

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Отделение Экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

| Тема работы |
|--|
| Получение параметров эффективного дипольного момента в аналитическом виде для молекулы типа XY_2 |

УДК 539.19.544.16

Студент

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|---------------|---------|------|
| 150Б41 | Люй ЦзюньЛинь | | |

Руководитель

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------------------|----------------|---------------------------|---------|------|
| Ассистент ИШФВП ТПУ | Распопова Н.И. | | | |

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|-------------|-----------------|---------------------------|---------|------|
| Доцент, ШИП | Черепанова Н.В. | к. ф. н. | | |

По разделу «Социальная ответственность»

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|-------------|----------------|---------------------------|---------|------|
| Доцент, ОКД | Ларионова Е.В. | к. х. н | | |

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

| Руководитель ООП | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|------------------|------------|---------------------------|---------|------|
| Руководитель ОЭФ | Лидер А.М. | д.т.н. | | |

Томск – 2018 г.

Запланированные результаты обучения по программе

| Код результата | Результат обучения (выпускник способен) | Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон |
|---|---|--|
| <i>Общекультурные компетенции</i> | | |
| Р1 | Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности | Требования ФГОС3+ (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4) |
| Р2 | К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС. | Требования ФГОС3+ (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9) |
| <i>Общепрофессиональные компетенции</i> | | |
| Р3 | Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка. | Требования ФГОС3+ (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7) |
| Р4 | Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры. | Требования ФГОС3+ (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6) |
| Р5 | Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности. | Требования ФГОС3+ (ОПК-8, ОПК-9) |
| <i>Профессиональные компетенции</i> | | |
| Р6 | <u>Научно-исследовательская деятельность</u> Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и | Требования ФГОС3+ (ПК-1, ПК-2) |

| | | |
|-----------|--|---|
| | <p>ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.</p> | |
| P7 | <p><u>Научно-инновационная деятельность</u> Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.</p> | <p>Требования ФГОС3+ (ПК-3, ПК-4, ПК-5)</p> |
| P8 | <p><u>Организационно-управленческая</u> Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования</p> | <p>Требования ФГОС3+ (ПК-6, ПК-7, ПК-8)</p> |
| P9 | <p><u>Педагогически-просветительская</u> Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний</p> | <p>Требования ФГОС3+ (ПК-9)</p> |

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий
Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
Отделение Экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
Руководитель ООП
_____ Лидер А.М.
(Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

| |
|---------------------|
| бакалаврской работы |
|---------------------|

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

| Группа | ФИО |
|--------|---------------|
| 150Б41 | Люй ЦзюньЛинь |

Тема работы:

| | |
|---|-----------------------|
| Получение параметров эффективного дипольного момента в аналитическом виде для молекулы типа XY ₂ | |
| Утверждена приказом директора (дата, номер) | 21.05.2018 г., 3582/с |

| | |
|--|--|
| Срок сдачи студентом выполненной работы: | |
|--|--|

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

| | |
|---|---|
| Исходные данные к работе <i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям</i> | Объектом исследования была выбрана молекула SO ₂ , предметом - оператор эффективного дипольного момента. |
|---|---|

| | | |
|---|---|---|
| <p>функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</p> | | |
| <p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</p> | | <p>– Обзор литературных источников;</p> <p>– Основные положения теории симметрии;</p> <p>– Молекула SO₂;</p> <p>– Анализ полученных результатов;</p> <p>– Социальная ответственность;</p> <p>– Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение;</p> <p>– Заключение.</p> |
| <p>Перечень графического материала</p> <p>(с точным указанием обязательных чертежей)</p> | | |
| <p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</p> | | |
| Раздел | Консультант | |
| Социальная ответственность | Ларионова Е.В., Доцент, ОКД, к. х. н | |
| Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение | Черепанова Н.В. , Доцент, ОКД, к. ф. н. | |

| | |
|--|--|
| <p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p> | |
|--|--|

Задание выдал руководитель:

| | | | | |
|------------------|------------|-------------------------------|----------------|-------------|
| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
| | | | | |

| | | | | |
|------------------------|----------------|--|--|--|
| Ассистент ИШФВП ТПУ | Распопова Н.И. | | | |
|------------------------|----------------|--|--|--|

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|---------------|---------|------|
| 150Б41 | Люй ЦзюньЛинь | | |

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

| | |
|---------------|---------------|
| Группа | ФИО |
| 150Б41 | Люй ЦзюньЛинь |

| | | | |
|----------------------------|-----------------|----------------------------------|---|
| Школа | ИЯТШ | Отделение школы (НОЦ) | Отделение экспериментальной физики ТПУ |
| Уровень образования | Бакалавр | Направление/специальность | 03.03.02 Физика |

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

| | |
|---|--|
| 1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i> | <i>Определение стоимости ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых информационных и человеческих(249221, 43руб)</i> |
| 2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i> | <i>Знакомство и отбор норм и нормативов расходования ресурсов</i> |
| 3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i> | <i>Районный коэффициент 30%, Отчисления во внебюджетные фонды - 27,1%</i> |

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

| | |
|---|---|
| 1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i> | <i>Оценка коммерческого и инновационного потенциала НТИ</i> |
| 2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i> | <i>Планирование процесса управления НТИ: структура и график проведения, бюджет.</i> |
| 3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i> | <i>Определение ресурсной, финансовой, экономической составляющей</i> |

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

| |
|--|
| 1. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i> 2. <i>Альтернативы проведения НИ</i> 3. <i>График проведения и бюджет НИ</i> 4. <i>Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ</i> |
|--|

| | |
|--|--|
| Дата выдачи задания для раздела по линейному графику | |
|--|--|

Задание выдал консультант:

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|-----------|------------------------------------|---------------------------|---------|------|
| Доцент | Черепанова Наталья Владимировна | к.ф.н. | | |

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|---------------|---------|------|
| 150Б41 | Люй ЦзюньЛинь | | |

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

| Группа | ФИО |
|--------|---------------|
| 150Б41 | Люй ЦзюньЛинь |

| Школа | ИЯТШ | Отделение школы (НОЦ) | Отделение экспериментальной физики ТПУ |
|---------------------|----------|---------------------------|--|
| Уровень образования | Бакалавр | Направление/специальность | 03.03.02 Физика |

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

| | |
|---|--|
| <p><i>1. Описание рабочего места (рабочей зоны, технологического процесса, механического оборудования) на предмет возникновения:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – вредных проявлений факторов производственной среды (метеоусловия, вредные вещества, освещение, шумы, вибрации, электромагнитные поля, ионизирующие излучения) – опасных проявлений факторов производственной среды (механической природы, термического характера, электрической, пожарной и взрывной природы) – негативного воздействия на окружающую природную среду (атмосферу, гидросферу, литосферу) – чрезвычайных ситуаций (техногенного, стихийного, экологического и социального характера) | <p>Данная научно-исследовательская работа выполнялась в помещении кафедры общей физики третьего корпуса Томского Политехнического университета в кабинете 126. Техническим средством является ПЭВМ</p> |
| <p><i>2. Знакомство и отбор законодательных и нормативных документов по теме</i></p> | <ul style="list-style-type: none"> - СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организация работы; - СП 52.13330.2011 Естественное и искусственное освещение - ГОСТ 12.1.009 – 2009 Система |

| | |
|---|---|
| | <p>стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения</p> <p>- ГОСТ 12.1.030 – 81 Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление.</p> <p>- ГОСТ 12.1.038-82 Электробезопасность. Предельно допустимые значения прикосновения и токов.</p> <p>- СНиП 21-01-97 Пожарная безопасность зданий и сооружений.</p> |
| Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке: | |
| <p><i>1. Анализ выявленных вредных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – физико-химическая природа вредности, её связь с разрабатываемой темой; – действие фактора на организм человека; – приведение допустимых норм с необходимой размерностью (со ссылкой на соответствующий нормативно-технический документ); – предлагаемые средства защиты (сначала коллективной защиты, затем – индивидуальные защитные средства) | <p>1. Характеристика факторов изучаемой производственной среды, описывающих процесс взаимодействия человека с окружающей производственной средой:</p> <p>1.Микроклимат;</p> <p>2.Уровень электромагнитного излучения;</p> <p>3.Недостаточная освещённость.</p> |
| <p><i>2. Анализ выявленных опасных факторов проектируемой производственной среды в следующей последовательности</i></p> <ul style="list-style-type: none"> – механические опасности (источники, средства защиты); – термические опасности (источники, средства защиты); – электробезопасность (в т.ч. статическое электричество, молниезащита – источники, средства защиты); | <p>2. Анализ опасных факторов проектируемой производственной среды:</p> <ul style="list-style-type: none"> – электробезопасность (непосредственное питание установки от сети постоянного тока 220В; средства защиты, предусмотренные конструкцией установки, соблюдение правил и инструкций по электробезопасности |

| | |
|--|--|
| – пожаровзрывобезопасность (причины, профилактические мероприятия, первичные средства пожаротушения) | при работе); Опасность возникновения пожара; |
| 3. Охрана окружающей среды: – защита селитебной зоны – анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы); – анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы); – анализ воздействия объекта на литосферу (отходы); – разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды. | 3. Деятельность данной научной работы не связана с производством, следовательно, влияние на окружающую среду минимально. |
| 4. Защита в чрезвычайных ситуациях: – перечень возможных ЧС на объекте; – выбор наиболее типичной ЧС; – разработка превентивных мер по предупреждению ЧС; – разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС; – разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий | 4. Защита в чрезвычайных ситуациях: Возможными ЧС в офисном помещении является сильные морозы, диверсия, а также возникновение пожара Приведены способы защиты от обморожения и пожара. |
| 5. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: – специальные (характерные для проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны | 5. Перечислена вся использованная литература |
| Перечень графического материала: | |
| При необходимости представить эскизные графические материалы к расчётному заданию (обязательно для специалистов и магистров) | 1. План эвакуации из лаборатории |

| | |
|--|--|
| Дата выдачи задания для раздела по линейному графику | |
|--|--|

Задание выдал консультант:

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|-----------|-----------|------------------------|---------|------|
| Доцент | Ларионова | Кандидат | | |

| | | | | |
|--|---------------------------|--------------------|--|--|
| | Екатерина Владимировна | химических наук | | |
|--|---------------------------|--------------------|--|--|

Задание принял к исполнению студент:

| Группа | ФИО | Подпись | Дата |
|--------|---------------|---------|------|
| 150Б41 | Люй ЦзюньЛинь | | |

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Уровень образования бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение Экспериментальной физики

Период выполнения

Форма представления работы:

бакалаврская работа

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:

| Дата контроля | Название раздела (модуля) /вид работы (исследования) | Максимальный балл раздела (модуля) |
|---------------|---|------------------------------------|
| 01.03.2017 | Аналитический обзор литературы | 15 |
| 01.09.2017 | Изучение основных положений теории симметрии и свойств молекулы SO ₂ | 15 |
| 30.12.2017 | Вычисление и получение результатов | 20 |
| 30.04.2018 | Анализ результатов | 15 |
| 25.05.2018 | Социальная ответственность | 15 |
| 25.05.2018 | Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение | 15 |
| 25.05.2018 | Заключение | 5 |

Составил преподаватель:

| Должность | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|--------------------|----------------|------------------------|---------|------|
| Ассистент ИФВП ТПУ | Распопова Н.И. | | | |

СОГЛАСОВАНО:

| Руководитель ООП | ФИО | Ученая степень, звание | Подпись | Дата |
|-------------------------|------------|-----------------------------------|----------------|-------------|
| Руководитель ОЭФ | Лидер А.М. | д.т.н. | | |

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 83 с., 7 рис., 20 табл., 20 источников, 3 приложения.

Ключевые слова: Молекулярная спектроскопия, эффективный дипольный момент, операторная теория возмущений, интенсивности.

На основании вышесказанного **объектом** исследования была выбрана молекула SO_2 , **предметом** - оператор эффективного дипольного момента.

Цель работы заключается в определение параметров эффективного дипольного момента в аналитическом виде на примере молекулы SO_2 .

Задача расчетов интенсивностей в колебательно-вращательных спектрах даже простых молекул не может считаться решенной на сегодняшний день. В работе исследованы новые подходы к ее решению, что, несомненно, **актуально**.

В процессе изучена теория симметрии, операторная теория возмущений и симметричные свойства молекулы SO_2 . Кроме того, построена матрица эффективного дипольного момента. Для реализации поставленных задач была использована квантовая алгебра в виде пакетов программ 'MAPLE17'.

В результате исследования были **впервые** получены параметры эффективного дипольного момента в аналитическом виде.

Область применения: астрофизика, планетология и атмосферная оптика, газоанализ.

Полученные результаты планируется использовать для анализа интенсивностей отдельных спектральных линий молекул типа ассиметричного волчка, с использованием спектра высокого разрешения (экспериментальная точность: $0,0025 \text{ см}^{-1}$). На основе исследования планируется опубликовать статью в международном журнале с высоким импакт-фактором.

Оглавление

| | |
|---|----|
| Введение..... | 18 |
| Глава 1. Основные положения теории симметрии | 20 |
| 1.1 Группы..... | 20 |
| 1.2 Точечные группы I и II рода | 21 |
| 1.3 Характеры | 22 |
| 1.4 Линейные и нелинейные молекулы | 23 |
| Глава 2. Молекула SO ₂ | 25 |
| 2.1 Приложения молекулы SO ₂ | 25 |
| 2.2 Свойства симметрии молекулы SO ₂ | 25 |
| Глава 3. Гамильтониан нелинейной молекулы | 29 |
| 3.1. Уравнение Шредингера | 29 |
| 3.2. Построение гамильтониана нелинейной молекулы | 30 |
| 3.3. Операторная теория возмущений..... | 33 |
| 3.4. Интенсивность линий | 37 |
| Глава 4. Расчет | 40 |
| Глава 5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение | 48 |
| 5.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности | 48 |
| проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения | 48 |
| 5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования | 48 |
| 5.1.2 Анализ конкурентных технических решений | 48 |
| 5.1.3 Технология QuaD | 50 |
| 5.1.4 SWOT-анализ | 52 |
| 5.2 Планирование научно-исследовательской работы..... | 54 |
| 5.2.1 Планирование этапов работ | 54 |
| 5.2.2 Определение трудоемкости выполнения НИОКР | 56 |
| 5.2.3 Техническая готовность темы..... | 57 |
| 5.2.4 Построение графика работ | 57 |
| 5.3 Бюджет научно-технического исследования (НТИ) | 62 |
| 5.3.1 Расчет материальных затрат НТИ | 62 |
| 5.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ | 62 |
| 5.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы | 63 |
| 5.3.4 Отчисления во внебюджетные фонды | 65 |
| 5.3.5 Накладные расходы | 66 |
| 5.3.6 Формирование бюджет затрат НТИ..... | 67 |
| Глава 6. Социальная ответственность | 68 |

| | |
|--|----|
| 6.1 Производная безопасность в компьютерном помещении среды | 68 |
| 6.2 Анализ вредных производных факторов окружающей работающей среды..... | 69 |
| 6.2.1 Микроклимат..... | 69 |
| 6.2.2 Уровень электромагнитного излучения..... | 70 |
| 6.2.3 Недостаточная освещённость | 71 |
| 6.3 Анализ опасных производных факторов окружающей работающей среды | 72 |
| 6.3.1 Электробезопасность | 72 |
| 6.3.2 Опасность возникновения пожара | 73 |
| 6.4 Рекомендации по минимизации влияния | 74 |
| 6.4.1 Рекомендации по улучшению микроклимата | 74 |
| 6.4.2 Рекомендации по минимизации влияния электромагнитных излучений | 74 |
| 6.4.3 Рекомендации по минимизации влияния освещения..... | 75 |
| 6.4.4 Рекомендации по защите от электрического тока | 75 |
| 6.4.5 Меры по обеспечению пожарной безопасности | 76 |
| 6.7 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности | 78 |
| Заключение | 79 |
| Приложения | 80 |
| Список литературы | 82 |

Введение

Актуальность работы и постановка задачи. Молекулярные колебательно-вращательные спектры являются наиболее полным и надежным источником информации о структурных, динамических характеристиках и физико-химических свойствах молекул. Важность исследования колебательно-вращательных спектров заключается в нахождение физико-химических свойств молекул с очень высокой точностью. Анализ колебательно-вращательных спектров поглощения высокого разрешения, который даёт наиболее полную и точную информацию о фундаментальных характеристиках молекулы, является одной из основных задач молекулярной спектроскопии. Анализ спектров позволяет определить уровни энергии молекул, найти спектроскопические постоянные, из которых впоследствии могут быть определены структурные параметры и потенциальная функция молекулы.

С другой стороны, кроме энергетической структуры, которую позволяет с высокой точностью определить анализ спектра, является важным знание интенсивностей спектральных линий. С прикладной точки зрения это определяется тем, что позволяет на основе экспериментальных данных об интенсивностях получать количественные характеристики среды такие, например, как температура, давление, концентрация. Знание такой зависимости, например, позволит дистанционно исследовать атмосферу планет Солнечной системы на предмет присутствия в них различных молекул, кроме того, определить давление и температуру. Во второй половине XX века был разработан теоретический подход и математический аппарат для определения интенсивности конкретной линии в спектрах молекул XY_2 -типа на основе понятия «эффективного дипольного момента». Суть этого подхода заключается в параметризации выражения дипольного момента молекулы, которое определяет вероятность квантового перехода и, следовательно, интенсивность отдельной спектральной линии. Для нахождения параметров дипольного

момента необходимо решить обратную спектроскопическую задачу, в основе которой будет лежать использование эффективного дипольного момента. Данная задача включает в себя подгонку (варьирование) параметров теоретической модели к экспериментальным данным (например, MORBID-метод, разработанный Йенсеном, расчёты, основанные на методе Монте-Карло и расчёты, использующие преобразование Ван-Флека). Такой подход имеет ряд недостатков. Например, для успешной реализации требуется большое число экспериментальной информации, огромные затраты компьютерного времени, даже с использованием современных суперкомпьютеров.

С другой стороны, если мы, каким либо образом сможем увеличить количество фиксированных параметров в рассматриваемой параметрической модели, то решение обратной спектроскопической задачи станет существенно проще. Для этого необходимо иметь аналитический вид параметров модели. Однако, как показывает практика, такого рода выражения отсутствуют на сегодняшний день в литературе.

На основании вышесказанного **объектом** исследования была выбрана молекула SO_2 , **предметом** - оператор эффективного дипольного момента.

Цель работы заключается в определении параметров эффективного дипольного момента в аналитическом виде на примере молекулы SO_2 .

Для реализации поставленной цели были определены следующие задачи:

1. Исследовать основные принципы построения эффективного гамильтониана;
2. Использовать программу MAPLE17 и написать код для расчета;
3. Определить коэффициенты оператора эффективного дипольного момента для молекулы SO_2 (типа- XY_2) полосы ν_2 .

Глава 1. Основные положения теории симметрии

Симметрия молекул широко используется как для классификации состояний, так и для изучения молекулярных процессов, находящих отражение в наблюдаемых спектрах молекул [1]. Поэтому знание симметрии молекулы и вытекающих из нее свойств важно для изучения количественных характеристик спектров молекул. В связи с этим в данной главе рассмотрим основные положения теории симметрии.

1.1 Группы

Совокупность всех операций симметрии, присущих некоторому физическому или математическому объекту, образует так называемую группу симметрии этого объекта. Строгое математическое определение группы состоит в следующем. Группой называется всякое множество G элементов, в которой выполняются свойства [1]:

1. Замкнутость:

если $a, b \in G$, и существует уникальное определение $c \in G$, $a * b = c$

2. Ассоциативность:

если $a, b, c \in G$, $(a * b) * c = a * (b * c)$

3. Наличие нейтрального элемента:

$E \in G, a \in G$, и $(a * E) = (E * a) = a$

Где, E - единичный элемент.

4. Наличие обратного элемента:

$\forall a \in G, \exists a^{-1} \in G, (a * a^{-1}) = (a^{-1} * a) = E$

Например: линейные функций (групповая операция –линейная замена переменных). Как известно, линейной называется функция вида $y=ax+b$, где a и b –произвольные числа($a \neq 0$). Поскольку групповой операцией является замена переменных, то под произведением двух функции $y=ax+b$ и $z=cx+d$ понимается

функция, которая получается путем замены независимой переменной x функцией на z ,

$$y \cdot z = a \cdot (c \cdot x + d) + b = (a \cdot c) \cdot x + (a \cdot d + b)$$

если $t = ex + f$, и можно получить :

$$y \cdot (z \cdot t) = (y \cdot z) \cdot t = (a \cdot c \cdot e) \cdot x + (a \cdot c \cdot f + a \cdot d + b)$$

Единичный элемент множества $y = x$. Обратный элементу $y^{-1} = a^{-1}x + (-a^{-1}b)$, поэтому:

$$y \cdot y^{-1} = y^{-1} \cdot y = x$$

Примерами групп являются: абелева группа, циклическая группа, группа действительных чисел при заданной операции умножения, симметрическая группа.

1.2 Точечные группы I и II рода

Вращения C_n называются собственными, зеркально-поворотные преобразования S_n называются несобственными вращениями. Группы симметрии, содержащие только собственные вращения, называются собственными группами, или точечными **группами первого рода**.

Несобственными группами, или точечными **группами второго рода** называются группы, которые получаются из собственных групп добавлением к ним плоскостей симметрии.

Примерами групп II рода является групп C_{nv} , D_{nh} , D_{nd} и т.д. Рассмотрим более подробно группу C_{nv} (группа симметрии правильной n -угольной пирамиды). Она содержит одну ось C совпадающую с высотой пирамиды, и n плоскостей симметрии σ_v , проходящих через ось C_n . Группа C_{nv} содержит $2n$ элементов $E, C_n, C_n^2, \dots, C_n^{n-1}, \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$. Группа C_{nv} изоморфна группе D_n .

В качестве еще одного примера проанализируем группу D_{3h} , на рис 1.1. представлена молекула PCl_5 , которая обладает данной симметрией. Группа D_{3h}

содержит 6 элементов группы C_{3h} , 3 горизонтальных осей C_2 и 3 вертикальных плоскостей $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, проходящих через эти оси, таким образом, 12 элементов.

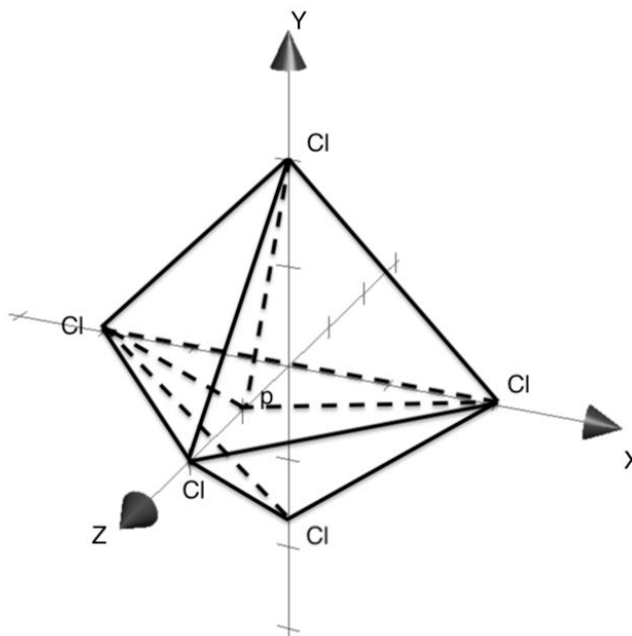


Рисунок 1.1 - Молекула PCl_5 (симметрия D_{3h}).

1.3Характеры

Характер $X(g)$ элемента g группы G в представлении T называется сумма диагональных элементов матрицы $T(g)$, следовательно $X(g) = \sum_i T_{ii}(g)$. В отличие от матриц $T(g)$ представления, которые зависят от выбора базиса, характеры матриц $T(g)$ от выбора базиса не зависят. Действительно, при преобразовании базиса операторы связаны соотношением.

Характеры представлений обладают еще рядом ценных математических свойств.

1.Характеры неприводимых неэквивалентных представлений группы ортогональны.

2. Скалярный квадрат характера неприводимого представления равен единице.

3. Характер приводимого представления $T(g)$ равен сумме характеров всех неприводимых представлений $T_V(g)$.

4. Два представления, имеющие одинаковые характеры, эквивалентны.

5. Если представление приводимо, то скалярный квадрат его характера больше единицы.

1.4 Линейные и нелинейные молекулы

Молекула представляет собой группу из двух или более атомов, которые химически связаны друг с другом. Выделяют два типа молекул: линейные и нелинейные [2].

Линейные молекулы – все атомы находятся на прямой (угол = 180°).

Нелинейные молекулы - все атомы не находятся на прямой (угол $\neq 180^\circ$).

Нелинейная молекула, состоящая из n атомов, имеет $3n$ степеней свободы: 3 – вращательных, 3 – поступательных и $3n-6$ – колебательных степеней свободы. Каждой степени свободы колебательного движения соответствует определенная частота.

Степени свободы для линейных и нелинейных молекул, можно видеть в Таблице 1.4.1.

Таблица 1.4.1 - Степени свободы для линейных и нелинейных молекул

| Вид молекулы | K_j | K_v | K_e |
|-------------------|-------|--------|-------|
| Линейные молекулы | 2 | $3n-5$ | $3n$ |
| Нелинейные | 3 | $3n-6$ | $3n$ |

| | | | |
|----------|--|--|--|
| молекулы | | | |
|----------|--|--|--|

где K_j – число вращательных степеней свободы, K_v – число колебательных степеней свободы, K_e – число степеней свободы электронного движения.

Глава 2. Молекула SO₂

2.1 Приложения молекулы SO₂

Двуокись серы играет важную роль как в чисто прикладных, так и в академических задачах [3]-[5].

Интерес к молекуле SO₂ обусловлен следующими факторами:

1) Диоксид серы оказывает большое влияние на атмосферную науку.

Из-за образования большого количества отходов в качестве отходов двуокись серы является одним из основных газов, загрязняющих атмосферу. Как следствие, двуокись серы играет важную роль в формировании атмосферы, например, в циркуляции атмосферы. Кроме того, двуокись серы имеет максимум в спектре поглощения света в ультрафиолетовой области (190-220 нм), что совпадает с максимумом в спектре поглощения озона. Это свойство диоксида серы позволяет утверждать, что присутствие этого газа в атмосфере также оказывает положительное влияние, предотвращая возникновение и развитие рака кожи человека. Двуокись серы в атмосфере Земли значительно ослабляет влияние парниковых газов, т. Е. Влияет на рост атмосферной температуры.

2) Спектр диоксида серы имеет большое значение для планетологии.

Диоксид серы и его различные изотопологи были идентифицированы в межзвездном пространстве, в планетарных туманностях, в атмосферах планет Солнечной системы, например Венера, в атмосфере которой оказалось диоксида серы больше, чем в атмосфере Земли.

2.2 Свойства симметрии молекулы SO₂

Молекулы SO₂ совмещается при выполнении следующих операций (рис.2.1-2.2):

1) тождественной операции E;

- 2) операций вращения на 180° вокруг трех взаимно перпендикулярных осей x , y и z , которые мы обозначим символами C_{2x} , C_{2y} и C_{2z} соответственно;
- 3) операций отражения в трех взаимно перпендикулярных плоскостях σ_{xy} , σ_{yz} и σ_{xz} , определяемых осями (x,y) , (y,z) и (x,z) соответственно.

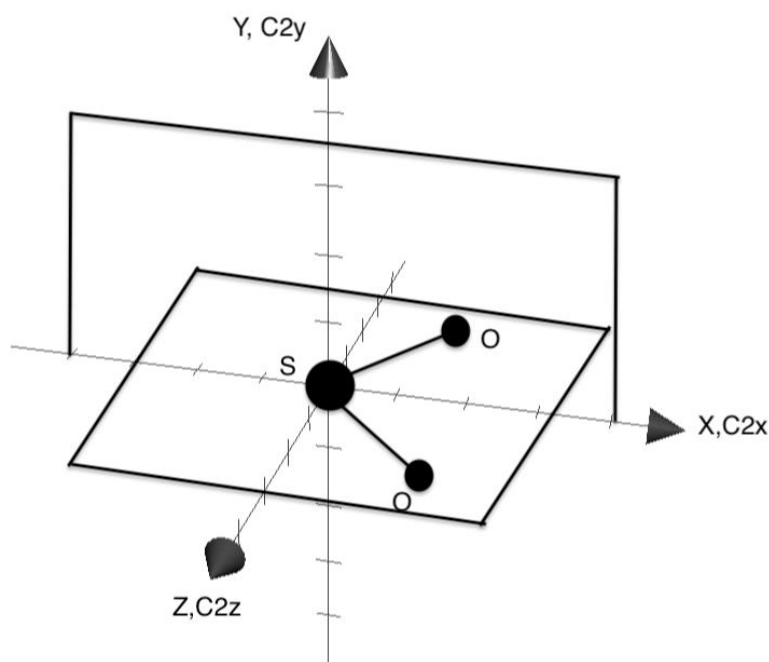


Рисунок 2.1 - Молекула SO_2 и элементы ее симметрии.

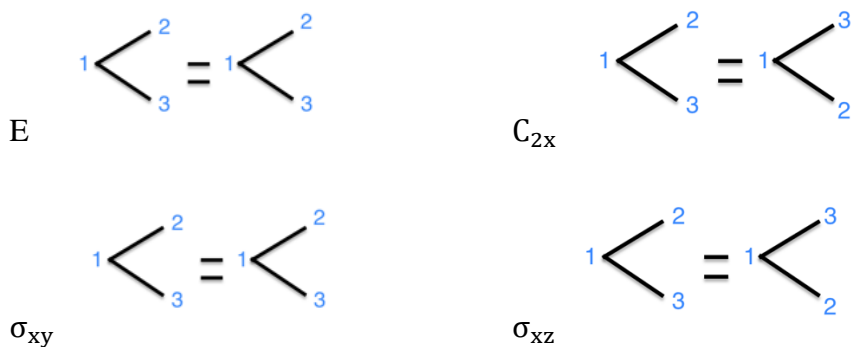
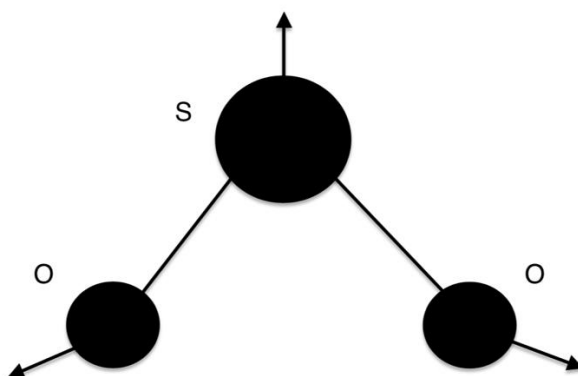


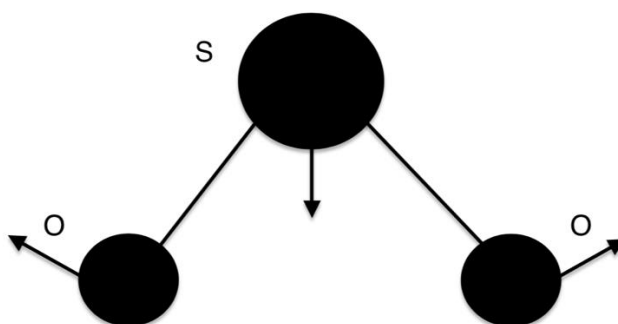
Рисунок 2.2 - Действие операций симметрии на расположение ядер в молекуле SO_2 .

В соответствии с таблицей 1.4.1., молекула SO_2 является нелинейной молекулой, у неё 3 вращательных степеней свободы, 3 колебательных степени свободы и 9 степеней свободы электронного движения. В молекулярной колебательно-вращательной спектроскопии рассматривают колебательно-вращательные степени свободы.

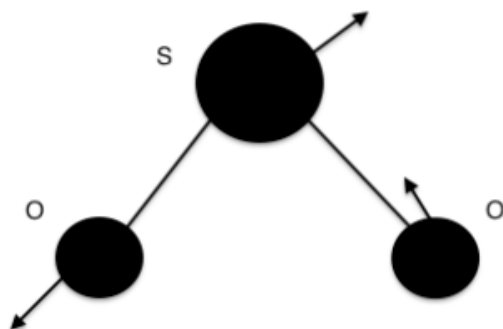
Существует три типа колебательных координат:



(a) $q_1 \in A_1$, симметричное валентное колебание;



(b) $q_2 \in A_1$, деформационное колебание



(с) $q_3 \in V_1$, антисимметричное валентное колебание.

A_1 и B_1 – неприводимые представления группы C_{2v} . Каждый оператор преобразуется по своему неприводимому представлению (Приложение А).

Глава 3. Гамильтониан нелинейной молекулы

Для описания молекулы как квантового объекта необходимо иметь вид собственной волновой функции, значение энергий, а также параметров гамильтониана молекулы. Для этого необходимо [6], во-первых, построить гамильтониан, во-вторых, согласно конкретному движению молекул, используя преобразование эрмита, гамильтониан можно привести к удобно вычисляемой форме, а именно в эффективный гамильтониан, чтобы впоследствии получить результат.

3.1. Уравнение Шредингера

Уравнение Шредингера – основное уравнение квантовой механики, описывающее динамику частиц [7]-[8]. В квантовой механике оператор Гамильтона является оператором полной энергии системы. Обычно он обозначается буквой \hat{H} . Это очень важная величина об этом будет написано ниже.

Волновая функция, соответствующая одной частице имеет вид:

$$\Psi(r, t) \quad (3.1.1)$$

гамильтониан для такой частицы запишется

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r, t), \quad (3.1.2)$$

где T – оператор кинетической энергии, V – оператор потенциальной энергии.

Уравнение Шредингера для одной частицы имеет вид:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi + V\Psi \quad (3.1.3)$$

В данном случае решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде произведения двух функций, одна из которых есть функция только координат, другая — только времени (3.1.4):

$$\psi(r, t) = \psi(r)\psi(t) \quad (3.1.4)$$

Это действие позволяет нам уравнение Шредингера записать в независимости от времени (3.1.5.).

$$H\Psi = E\Psi \quad (3.1.5)$$

Уравнение (3.1.5) называется уравнением Шредингера для стационарных состояний. В это уравнение в качестве параметра входит полная энергия E частицы. В теории дифференциальных уравнений доказывается, что подобные уравнения имеют бесчисленное множество решений, из которых посредством наложения граничных условий отбирают решения, имеющие физический смысл.

Регулярные решения не выполняются при любых значениях параметра E , а только для некоторого набора параметров, характерных для данной задачи. Эти значения энергии называются внутренними. Решения, соответствующие собственным значениям энергии, называются собственными функциями. Собственные значения E могут образовывать как непрерывный, так и дискретный ряды. В первом случае мы говорим о непрерывном спектре, во втором случае речь идет о дискретном спектре. Применительно к задачам молекулярной спектроскопии, будем иметь дискретный набор собственных значений или энергий [9].

3.2. Построение гамильтониана нелинейной молекулы

С физической точки зрения, молекула - это система, состоящая из атомных ядер и электроны. Следовательно, для того чтобы точно описать уровни энергии молекулы, необходимо решить уравнение Шредингера с гамильтонианом, зависящим от координат и спинов всех частиц, которые образуют молекулу, и учитывающим все виды взаимодействия между этими частицами [10].

В случае описания молекул гамильтониан в нерелятивистском случае имеет вид следующий :

$$H = T_{\text{яд}} + T_{\text{эл}} + V \quad (3.2.1)$$

где $T_{\text{яд}}$ – оператор кинетической энергии ядер; $T_{\text{эл}}$ – оператор кинетической энергии электронов; V – потенциальная функция.

Операторы $T_{\text{яд}}$, $T_{\text{эл}}$ и V имеют вид:

$$T_{\text{яд}} = \frac{-\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right), \quad (3.2.2)$$

$$T_{\text{эл}} = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right), \quad (3.2.3)$$

$$V = \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{\substack{N,N' \\ N>N'}} \frac{z_N z_{N'}}{r_{NN'}} - \sum_{i,N} \frac{e z_N}{r_{iN}}, \quad (3.2.4)$$

где m_N является массой N -го ядра; m_e является массой электрона; z_N является зарядом ядра; e является зарядами электрона.

Вместе с тем хорошо известно, что если отвлечься от поступательного движения молекулы как целого, то нам более удобным и практически всегда более употребляемым способом описания состояний молекулы является такой, при котором функции состояний зависят от ориентации молекулы (вращательные переменные) и от относительного расположения ядер молекулы (колебательные переменные). Иными словами, для описания состояний молекулы используются координатные системы, каким-либо образом связанные с ней.

В нашем случае такого рода переменными являются нормальные координаты. Пусть известен закон преобразования для самих координат и их производных:

$$x_n = f_n(q_1, q_2, q_3 \dots q_m, t) \quad (3.2.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_n} = \Phi_n(q_1, q_2, q_3 \dots q_m, \frac{\partial}{\partial q_l}), \quad (3.2.6)$$

где q_λ – нормальные координаты.

Так как процедура перехода очень сложная мы приводить ее не будем. Однако можно показать [2], что гамильтониан, записанный в нормальных координат имеет вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \omega_{\lambda} (p_{\lambda}^2 + q_{\lambda}^2) + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta}) + V(Q), \quad (3.2.7)$$

где, $P_{\lambda} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_{\lambda}}$ - импульс, сопряжённый с координатой q_{λ} ; $\mu_{\alpha\beta}$ - элементы матрицы обратных моментов инерции; J_{α} - компоненты оператора полного углового момента.

Потенциальная функция $V(Q)$ имеет вид:

$$V(Q) = + \sum_{\lambda\mu\nu} K_{\lambda\mu\nu} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu} + \sum_{\lambda\mu\nu\xi} K_{\lambda\mu\nu\xi} q_{\lambda} q_{\mu} q_{\nu} q_{\xi} + \dots, \quad (3.2.8)$$

колебательный угловой момент:

$$G_{\alpha} = \sum_{\lambda\mu} \zeta_{\lambda\mu}^{\alpha} [(\frac{\omega_{\mu}}{\omega_{\lambda}})^{1/2} q_{\lambda} p_{\mu} - (\frac{\omega_{\lambda}}{\omega_{\mu}})^{1/2} q_{\mu} p_{\lambda}], \quad (3.2.9)$$

здесь, $\mu_{\alpha\beta}$ — матрица обратных моментов инерции, которая определяется следующим образом:

$$\frac{1}{2} \mu_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\mu_{\alpha\beta}^e + \sum_{\alpha\beta\lambda} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda} q_{\lambda} + \sum_{\alpha\beta\lambda\mu} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} q_{\lambda} q_{\mu} + \dots \right) \quad (3.2.10)$$

Равновесные вращательные постоянные B_{α}^e , параметры Кориолиса $\zeta_{\lambda\mu}^{\alpha}$ и $a^{\alpha\gamma}_{\lambda}$ зависят только от равновесных структурных параметров $r_{N\alpha}^e$ молекулы, массы ядер и констант форм колебаний $l_{N\alpha\lambda}$.

Вследствие симметрии молекулы SO_2 можно показать, что параметры Кориолиса $\zeta_{\lambda\mu}^{\alpha}$, параметры $I_{\alpha\alpha}^e$ и $a^{\alpha\gamma}_{\lambda}$ имеют вид:

$$\zeta_{13}^y = -\zeta_{31}^y = \zeta_{13} = -\left(\frac{I_{xx}^e}{I_{yy}^e}\right)^{1/2} \sin\gamma + \left(\frac{I_{zz}^e}{I_{yy}^e}\right)^{1/2} \cos\gamma \quad (3.2.11)$$

$$\zeta_{23}^y = -\zeta_{32}^y = \zeta_{23} = \left(\frac{I_{xx}^e}{I_{yy}^e}\right)^{1/2} \cos\gamma + \left(\frac{I_{zz}^e}{I_{yy}^e}\right)^{1/2} \sin\gamma \quad (3.2.12)$$

где $a^{\alpha\gamma}_{\lambda}$ определяются в соответствие с формулами (13)-(20):

$$a_{1}^{xx} = 2(I_{xx}^e)^{1/2} \cos\gamma \quad (3.2.13)$$

$$a_{2}^{xx} = 2(I_{xx}^e)^{1/2} \sin\gamma \quad (3.2.14)$$

$$a_{1}^{yy} = 2(I_{yy}^e)^{1/2} \zeta_{23} \quad (3.2.15)$$

$$a^{yy}_2 = -2(I_{yy}^e)^{1/2}\zeta_{13} \quad (3.2.16)$$

$$a^{zz}_1 = 2(I_{zz}^e)^{1/2}\sin\gamma \quad (3.2.17)$$

$$a^{zz}_2 = -2(I_{zz}^e)^{1/2}\cos\gamma \quad (3.2.18)$$

$$a^{xz}_3 = a^{zx}_3 = -2\left(\frac{I_{zz}^e I_{xx}^e}{I_{yy}^e}\right)^{1/2} \quad (3.2.19)$$

$$I_{\alpha\alpha}^e = \frac{h}{8\pi^2 c B^e_{\alpha}} \quad (3.2.20)$$

3.3. Операторная теория возмущений

Известно [11]-[13], что уравнение Шредингера имеет конкретное решение только для молекулярных систем, подобных модели молекулярного иона водорода H_2^+ . Для решения задачи более сложных молекул, необходимо использовать теорию возмущения. Гамильтониан системы при этом обычно выбирается в следующем виде $H_{\kappa b}(a) = H_0(a) + h(a, b)$, где $H_0(a)$ – оператор, решение уравнения Шредингера с которым известно; $h(a, b)$ – малая добавка к оператору (возмущение) H_0 ; a, b – набор переменных, от которых зависит гамильтониан, a – колебательные координаты и b – вращательные координаты.

Для решения уравнения Шредингера с таким гамильтонианом используют унитарное преобразование, после которого собственные колебательно-вращательные волновые функции гамильтониана меняют на волновые функции эффективного гамильтониана. Задача разбивается на два этапа, что упрощает и делает возможным решение уравнения Шредингера для многоатомных молекул. Подобного рода практика (использования унитарного преобразования для упрощения решения уравнения Шредингера) применима и для успешной реализации цели исследования.

Для удобства рассмотрения колебательно-вращательного гамильтониана, распишем его по порядкам малости χ (χ^n - порядок малости по отношению к оператору $H_0(\chi^0)$):

$$H_{\text{к.в.}} = H_0(\chi^0) + h_1(\chi^1) + h_2(\chi^2) + \dots + h_n(\chi^n), \quad (3.3.2)$$

$$H_0(\chi^0) = \frac{1}{2} (\sum_{\lambda} P_{\lambda} + \sum_{\lambda} Q_{\lambda}^2 \omega_{\lambda}^2), \quad (3.3.3)$$

$$h_1(\chi^1) = \frac{1}{6} \sum_{\lambda \nu \mu} \left(\frac{\partial^3 V}{\partial Q_{\lambda} \partial Q_{\nu} \partial Q_{\mu}} \right) Q_{\lambda} Q_{\nu} Q_{\mu}, \quad (3.3.4)$$

$$h_2(\chi^2) = \frac{1}{24} \sum_{\lambda \nu \mu \gamma} \left(\frac{\partial^4 V}{\partial Q_{\lambda} \partial Q_{\nu} \partial Q_{\mu} \partial Q_{\gamma}} \right) Q_{\lambda} Q_{\nu} Q_{\mu} Q_{\gamma} \\ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \beta} \mu_{\alpha \beta}^{\varepsilon} (J_{\alpha} - G_{\alpha})(J_{\beta} - G_{\beta})$$

(3.3.5)

В традиционной теории возмущений искомые величины (поправки к собственной энергии и волновые функции) получаются в виде суммы различных комбинаций матричных элементов, то есть числа. В то же время матричные элементы операторов возмущений по собственным функциям оператора нулевой аппроксимации уже являются операторами. Более того, в общем случае эти операторы не коммутируют и, как следствие, в теории нет эрмитовых вкладов в оператор энергии. По этой причине использование результатов традиционной теории возмущений для рассматриваемых проблем неприемлемо.

Решение заключается в применении методе эффективных операторов [14]. Кратко основная идея подхода опишем следующим образом: пусть решение уравнение Шредингера с исходным гамильтонианом невозможно (или представляет собой слишком сложную задачу). Тогда необходимо построить такой эрмитов оператор H' , который отвечал бы следующим требованиям:

1. решение уравнения Шредингера с этим оператором определяется в явном виде;

2. множество B' всех решений уравнения Шредингера с оператором H' совпадает с неким подмножеством B множества A всех решений уравнения Шредингера с исходным оператором H . Удовлетворяющий этим требованиям оператор H' называют эффективным на подмножестве B гамильтонианом.

Пусть E_α и $|\alpha\rangle$ – собственные значения, и собственные функции оператора H_0 , при этом $|\alpha\rangle$ образует полный ортонормированный набор функций, которые зависят от переменных b и удовлетворяют условиям полноты и ортонормированности. Тогда функции $|\alpha, i\rangle = |\alpha\rangle |i\rangle$ также будут образовывать полный набор ортонормированных функций в гильбертовом пространстве.

Для того чтобы разделить задачу на две: колебательную и вращательную, вводят унитарный оператор G , с помощью которого мы можем перейти к новому эффективному гамильтониану, имеющему тот же набор собственных значений (7).

$$H_{\text{эфф}} = G^+ H G \quad (3.3.7)$$

Так как оператор G является произвольным, то мы можем его выбрать в таком виде, чтобы он позволял привести матрицу гамильтониана к блочно-диагональному виду (8):

$$\langle \alpha | H_{\text{эфф}} | \beta \rangle = \begin{pmatrix} H & 0 & 0 & \dots \\ 0 & x & x & \dots \\ 0 & x & x & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}. \quad (3.3.8)$$

В этом случае необходимыми условиями являются (3.3.9)-(3.3.10):

$$\langle \alpha^0 | H_{\text{эфф}} | \beta' \rangle = \langle \alpha^0 | G^+ H G | \beta' \rangle = 0 \quad (3.3.9)$$

$$\langle \alpha' | H_{\text{эфф}} | \beta^0 \rangle = \langle \alpha' | G^+ H G | \beta^0 \rangle = 0 \quad (3.3.10)$$

Функцию G можно разложить в ряд Тейлора:

$$G = \exp(i \sum_n^\infty g_n(\chi^n)) \quad (3.3.11)$$

$$G^+ = \exp(-i \sum_n^\infty g_n(\chi^n)) \quad (3.3.12)$$

Распишем напрямую формулы (3.3.9)-(3.3.10):

$$\begin{aligned} < \alpha^0 | H | \beta' > = < \alpha^0 | G^+ H G | \beta' > \\ &= < \alpha^0 \left| \exp \left(i \sum_n^\infty g_n(\chi^n) \right) \cdot H \cdot \exp \left(-i \sum_n^\infty g_n(\chi^n) \right) \right| \beta' > \\ &= < \alpha^0 \left| \left(1 - i \sum_{n=1}^\infty g_n(\chi^n) + \frac{1}{2} (-i^2) \left(\sum_{n=1}^\infty g_n(\chi^n) \right)^2 + \dots \right) (H_0 + h) \left\{ 1 \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + i \sum_{n=1}^\infty g_n(\chi^n) + \frac{1}{2} (-i^2) \left(\sum_{n=1}^\infty g_n(\chi^n) \right)^2 + \dots \right\} \right| \beta' > = 0 \end{aligned} \quad (3.3.13)$$

Поскольку прямое вычисление является слишком сложным разложим (3.3.13) по так называемым порядкам малости \hbar :

$$< \alpha^0 | H_0 | \beta' > = 0 \quad (3.3.14)$$

$$< \alpha^0 | h_0 - i g_1 H_0 + H_0 i g_1 | \beta' > = 0 \quad (3.3.15)$$

$$< \alpha^0 | h_2 - i g_1 h_1 + H_0 i g_2 - i g_2 H_0 - \frac{1}{2} g_1^2 H_0 - \frac{1}{2} H_0 g_1^2 - i g_1 H_0 i g_1 | \beta' > \geq 0 \quad (3.3.16)$$

В случае, когда $< \alpha^0 | = < 000 |$ первое уравнение представляет собой тождество. Вычисляя мы можем получить:

$$< 000 | i g_1 | \beta' > = \frac{< 000 | h | \beta' >}{E_{\beta'} - E_{000}} \quad (3.3.17)$$

$$< 000 | i g_2 | \beta' > = \frac{< 000 | h | 000 > < 000 | h | \beta' >}{(E_{\beta'} - E_{000})^2} - \sum_{\alpha \neq 0} \left(\frac{< 000 | h | \alpha > < \alpha | h | \beta' >}{(E_{\beta'} - E_{000})(E_{\alpha} - E_{000})} \right) \quad (3.3.18)$$

Если теперь построить числовую матрицу, то она будет иметь тот же вид, что и построенная. Собственные значения оператора $H_{эфф}$ следовательно, и оператора H , можно определить за счёт диагонализации полученной матрицы $H_{эфф}$. Более главное здесь то, что подматрица $< i | H_{эфф} | j >$ представляет собой конечномерную по индексам $|\alpha>$ и $|\beta>$. В этом случае, если нас интересуют только вращательные уровни энергии какого-нибудь колебательного состояния,

порождаемые состояниями $\langle \alpha^0 |$, нет никакой необходимости диагонализировать всю матрицу $\langle i | \langle \alpha | H_{\text{эфф}} | \beta \rangle | j \rangle$, достаточно ограничиться рассмотрением её подматрицы $\langle i | H_{\text{эфф}} | j \rangle$, где $H_{\text{эфф}} = \langle \alpha^0 | H_{\text{эфф}} | \beta^0 \rangle$.

Оператор $H_{\text{эфф}}$ называют эффективным оператором системы N состояний $|\alpha_1^0\rangle, |\alpha_2^0\rangle, \dots, |\alpha_n^0\rangle$. Интересен случай, когда эффективный оператор вырождается в матрицу размера 1×1 - диагональную. Такой случай является наиболее простым, оператор H^1 выглядит следующим образом:

$$\begin{aligned}
 H^1 &= E_1 + \langle 1 | h | 1 \rangle \\
 &+ \sum_{v \neq 1} \frac{\langle 1 | h | v \rangle \langle v | h | 1 \rangle}{E_1 - E_v} + \sum_{v \neq 1, r \neq 1} \frac{\langle 1 | h | v \rangle \langle v | h | r \rangle \langle r | h | 1 \rangle}{(E_1 - E_v)(E_1 - E_r)} \\
 &- \frac{1}{2} \sum_{v \neq 1} \frac{\langle 1 | h | 1 \rangle \langle 1 | h | v \rangle \langle v | h | 1 \rangle - \langle 1 | h | v \rangle \langle v | h | 1 \rangle \langle 1 | h | 1 \rangle}{(E_1 - E_v)^2}
 \end{aligned} \tag{3.3.19}$$

3.4. Интенсивность линий

В 1916 году Альберт Эйнштейн указал, что существует три основных процесса формирования атомных линий, которые называются спонтанным излучением, вынужденное излучением и (вынужденное) поглощением соответственно. Каждый процесс соответствует так называемому коэффициенту Эйнштейна, что указывает на вероятность процесса. Можно показать [15], что интенсивность спектральной линий напрямую зависит от вероятности перехода, которая определяется квадратом матричного элемента от дипольного момента. Интенсивность линии - это энергетическая характеристика излучения, излучаемого (или поглощенного) единицей объема вещества при квантовом переходе составляющих атомов (молекул) от одного уровня энергии к другому. Интенсивность спектральной линии зависит от

условий, в которых находится излучающая (поглощающая) среда, а именно температуры, плотности, концентрации источников излучения. Интенсивность спектральной линии - одна из основных измеряемых характеристик в спектроскопии и спектральном анализе.

Заметим, что переходы в молекуле возможны не между любыми уровнями, а только между определенными. Эти возможные переходы определяются так называемыми правилами отбора. Дело в том, что молекула может поглотить электромагнитное излучение только в том случае, когда в ней произойдет работа. Эту работу выполняет электрическая составляющая электромагнитной волны, изменяя положение электрических центров молекулы. Молекула в целом электронейтральна. Однако у подавляющего большинства молекул одна из групп атомов составляющих молекулу, постоянно заряжена положительно, а другая отрицательно, так что центры положительного и отрицательного зарядов не совпадают. В этом случае говорят, что молекула обладает дипольным моментом. Дипольный момент P молекулы определяется выражением (3.4.1.):

$$P = \sum_i e_i r_i, \quad (3.4.1.)$$

где суммирование проводится по всем частицам молекулы (электронам и ядрам); e_i и r_i - заряд и радиус вектор i -й частицы.

Известно [16], что интенсивность колебательно-вращательной линии определяется из соотношения:

$$S_v = \frac{8\pi^3 \nu}{4\pi\epsilon_0 3hc} \left[1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}} \right] N \frac{g_A}{Z(T)} e^{-\frac{E_A}{kT}} R_A^B, \quad (3.4.2)$$

где, $\nu = (E_B - E_A)/hc$ - волновое число перехода, E_A и E_B - колебательно-вращательные энергии нижнего и верхнего состояний; g_A - статистический вес для ядерного спина; $Z(T)$ - статистическая сумма. Значение $R_A^B = |\langle A | \mu_z | B \rangle|^2$ - квадрат матричного элемента, так называемого оператора эффективного дипольного момента:

$$\mu_z' = G^+ \mu_z G = G^+ \left[\sum_{\alpha} k_{z\alpha} \left(\mu_{\alpha}^e + \sum_{\lambda} \mu_{\alpha}^{\lambda} q_{\lambda} + \sum_{\lambda, \nu \geq \lambda} \mu_{\alpha}^{\lambda\nu} q_{\lambda} q_{\nu} + \dots \right) \right] G \quad (3.4.3)$$

где $|A\rangle$ и $|B\rangle$ - функции нижнего и верхнего колебательно-вращательных состояний. В уравнении (3.4.3) μ_z - это z- компонента реального дипольного момента в пространственно-фиксированной системе координат. G – унитарный оператор; $k_{z\alpha}$ - элемент матрицы направляющих косинусов; μ_{α}^e , μ_{α}^{λ} , $\mu_{\alpha}^{\lambda\nu}$ - параметры дипольного момента, q_{λ}, q_{ν} - нормальные координаты. В общем случае параметры дипольного момента могут быть записаны виде функций от интегралов по электронным переменным. Поскольку корректное вычисление таких интегралов для произвольных многоатомных молекул до сих пор остается неразрешимой задачей, то на практике параметры μ_{α}^e , μ_{α}^{λ} , $\mu_{\alpha}^{\lambda\nu}, \dots$ определяют, исходя из экспериментальных данных по интенсивностям колебательно-вращательных линий.

В литературе существует большое число работ по определению матричного элемента дипольного момента [17]-[21], однако, метод, который используется на данный момент (вариационный) требует много экспериментальной информации, времени, а также необходимость применения различного рода приближений (например, переход от дипольного момента молекулы к эффективному дипольному моменту).

С другой стороны, имея аналитический вид параметров эффективного дипольного момента, можно не зная экспериментальной информации о молекуле предсказать значения параметров в разложении эффективного дипольного момента, и таким образом получить значения интенсивности спектральных линий пропуская этап варьирования. Именно, разработке такого подхода посвящена настоящая дипломная работа.

Глава 4. Расчет

Как отмечалось в главе 3, основная проблема при теоретическом исследовании интенсивностей линий поглощения заключается в расчете матричных элементов $R_A^B = \left| \langle A | \mu_z' | B \rangle \right|^2$ оператора дипольного момента молекулы на точных собственных функциях гамильтониана свободной молекулы.

В свою очередь, поскольку точно решить уравнение Шредингера с гамильтонианом многоатомной молекулы невозможно, то используются различные приближенные методы (один из которых подробно описан в главе 3), позволяющие построить так называемый эффективный гамильтониан и затем уже решить уравнение Шредингера. В этом параграфе мы применим результаты главы 3 для расчета матричных элементов R_A^B (т.е. для расчета интенсивностей линий).

Мы в дальнейшем будем, как обычно, говорить о колебательно-вращательных переходах, происходящих в пределах одного электронного состояния. В этом случае в формуле (3.4.3) вместо R_A^B будут присутствовать матричные элементы оператора $R_\alpha \equiv \langle e | R_A^B | e \rangle$ - усредненного для данного электронного состояния оператора дипольного момента $R^{AB}_\alpha \equiv \langle A | R_A | B \rangle$, где функции A, B являются собственными функциями колебательно-вращательного гамильтониана $H_{\text{кв}}(a) = H_0(a) + h(a, b)$. Оператор R_A в $R^{AB}_\alpha \equiv \langle A | R_A | B \rangle$ записанный во внутримолекулярных координатах имеет вид (3.4.3).

Итак, пусть $\langle A |$ собственные функции оператора H . Перейдем от оператора к унитарно эквивалентному ему оператору:

$$H_{\text{эфф}} = G^+ H G. \quad (4.1.)$$

Проделаем еще раз все преобразования, выполненные в главе 3. В этом случае, как показано в главе 3, собственные значения исходного оператора H ,

связанные с выделенной системой взаимодействующих колебательных состояний $|x\rangle \in \Omega$ (Ω - множество резонирующих друг с другом колебательных состояний) определяются как решения уравнения Шредингера с эффективным оператором $H_{\text{эфф}}$. Соответствующие волновые функции (собственные функции исходного гамильтониана), как не трудно понять, имеют вид:

$$\Phi_A = GA. \quad (4.2.)$$

Полученные волновые функции (4.2.) будут в дальнейшем использоваться для нахождения матричного элемента от эффективного дипольного момента.

В разделе 3.3., опираясь на вышесказанное, нами были определены новые волновые функции (4.2.) в явном виде. Функция Φ_A считается известной, если имеется явный вид матрицы унитарного оператора G , а именно, определены значения матричных элементов (3.3.17)- (3.3.18). Построим матрицу дипольного момента на колебательно-вращательных функциях Φ_A . В этом случае матрица будет иметь блочно-диагональный вид:

$$\langle \alpha | P_{\text{эфф}} | \beta \rangle = \begin{pmatrix} P & 0 & 0 & \dots \\ 0 & x & x & \dots \\ 0 & x & x & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \quad (4.3.)$$

Это позволяет нам выделить из бесконечномерной матрицы блок, отвечающий за переход между состояниями $(000) \rightarrow (010)$. Пусть, состояние $|000\rangle = |v\rangle$ и $|000\rangle = |v_2\rangle$, тогда элемент матрицы эффективного дипольного момента будет иметь вид:

$$P_{\text{эфф}}^{vv_2} = \langle v | G^+ P G | v_2 \rangle \quad (4.4.)$$

Известно [22], что во второй половине XX века был разработан теоретический подход и математический аппарат для определения интенсивности конкретной линии в спектрах молекул XY_2 -типа на основе понятия «эффективного дипольного момента». Суть этого подхода заключается

в параметризации выражения дипольного момента молекулы, которое определяет вероятность квантового перехода и, следовательно, интенсивность отдельной спектральной линии. Можно показать, что эффективный дипольный момент является суммой 8 операторов (Таблица 4.1.):

Таблица 4.1.- Операторы, входящие в эффективный дипольный момент.

| Коэффициенты | Операторы |
|--------------|---|
| μ_x^1 | K_{zx} |
| μ_x^2 | $\{K_{zx}, J^2\}$ |
| μ_x^3 | $\{K_{zx}, J_z^2\}$ |
| μ_x^4 | $\{iK_{zy}, J_z\}$ |
| μ_x^5 | $\{K_{zz}, iJ_y\}$ |
| μ_x^6 | $\{K_{zz}, -J_x J_z + J_z J_x\}$ |
| μ_x^7 | $\frac{1}{2}\{K_{zx}, J_{xy}^2\} - \{iK_{zy}, i(J_x J_y + J_y J_x)\}$ |
| μ_x^8 | $\frac{1}{2}\{K_{zx}, J_{xy}^2\} + \{iK_{zy}, i(J_x J_y + J_y J_x)\}$ |

На основании этого, а также используя основные принципы операторной теории возмущений, теории симметрии нами было получено в явной аналитической форме вид 1, 4 и 5 параметров в разложении эффективного дипольного момента. Полученные выражения можно видеть в Таблица 4.2.

Таблица 4.2. - Коэффициенты μ_x^1 , μ_x^4 и μ_x^5

| j | Операторы | Аналитический вид |
|-----------|--------------------|---|
| μ_x^1 | K_{zx} | $\frac{\sqrt{2}}{2} \mu_x^2$ |
| μ_x^4 | $\{iK_{zy}, J_z\}$ | $\frac{\sqrt{2}}{2} \mu_x^e \mu_{zz}^2$ |

| | | |
|-----------|---------------------|--|
| μ_x^5 | $\{iK_{zz}, iJ_y\}$ | $\left(\xi_{23}^y \mu_z^3 \mu_{yy}^e \frac{(2\omega_\lambda \omega_3)^{\frac{1}{2}}}{\omega_3^2 - \omega_\lambda^2} \right) - \frac{\mu_{yy}^e \mu_{yy}^2}{\sqrt{2}\omega_2}$ |
|-----------|---------------------|--|

Как видно из Таблицы 4.2 для расчета параметров в разложении эффективного дипольного момента необходимо иметь в явном виде вращательные параметры $\mu_{\alpha\beta}^e, \mu_{\alpha\beta}^\lambda, \mu_{\alpha\beta}^{\lambda\mu}$. Поэтому, следующим шагом нашего исследования было получение вида этих параметров. Для расчетов были использованы свойства симметрии молекулы SO_2 (XY_2 -типа). Симметрия операторов данной молекулы приведена в Приложении Б.

Опишем подробнее логику получения данных параметров. Исходя из вышеизложенного, известно, что h можно записать как:

$$h = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} (J_\alpha - G_\alpha)(J_\beta - G_\beta), \quad (4.4)$$

где

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \mu_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\mu_{\alpha\beta}^e + \sum_{\alpha\beta\lambda} \mu_{\alpha\beta}^\lambda q_\lambda + \sum_{\alpha\beta\lambda\mu} \mu_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} q_\lambda q_\mu + \dots \right) \quad (4.5)$$

Для удобства расчета разделим (4.4) на три части:

$$1. \mu_{\alpha\beta}^e (J_\alpha - G_\alpha)(J_\beta - G_\beta), \quad (4.6)$$

где, $\alpha, \beta = x, y, z$, поэтому:

$$\mu_{\alpha\beta}^e = \mu_{xx}^e + \mu_{yy}^e + \mu_{zz}^e + \mu_{xy}^e + \mu_{xz}^e + \mu_{yz}^e = B_{\alpha\beta}^e \delta_{\alpha\beta} \quad (4.7)$$

Вращательный угловой момент обладает следующей симметрией: $J_x \in B_2, J_y \in B_1, J_z \in A_2$. Колебательный угловой момент G_α запишем с учетом симметричных свойств молекулы SO_2 (XY_2 -типа) как,

$$G_\alpha = \sum_{\lambda\mu} \zeta_{\lambda 3}^\alpha \left[\left(\frac{\omega_3}{\omega_\lambda} \right)^{1/2} q_\lambda p_3 - \left(\frac{\omega_\lambda}{\omega_3} \right)^{1/2} q_3 p_\lambda \right], \quad (4.8)$$

где λ и μ пробегает значения от 1 до 2.

Как следствие будем иметь (4.6) в форме (4.9.):

$$\frac{1}{2} [\mu_{\alpha\alpha}^e J_\alpha^2 - \mu_{xy}^e J_x G_y + \mu_{yy}^e (-2J_y G_y - G_y^2)] \in A_1 \quad (4.9.)$$

$$2. \sum_{\alpha\beta\lambda} \mu_{\alpha\beta}^\lambda q_\lambda (J_\alpha - G_\alpha)(J_\beta - G_\beta).$$

(4.10)

Здесь вращательный параметр $\mu_{\alpha\beta}^\lambda$ определяется по формуле (4.11)

$$\sum_{\alpha\beta\lambda} \mu_{\alpha\beta}^\lambda q_\lambda = \sqrt{2} \sum_{\lambda} \left(\frac{B_\alpha^e B_\beta^e}{\omega^{1/2}_\lambda} \right) \left(\frac{8\pi^2 c}{h} \right)^{\frac{1}{2}} a^{\alpha\beta}_\lambda q_\lambda.$$

(4.11)

Используя ранее описанную логику можно преобразовать (4.11) в (4.12):

$$\frac{1}{2} \left[\sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{\lambda=1,2} \mu_{\alpha\alpha}^\lambda q_\lambda J_\alpha^2 - \sum_{\lambda=1,2} \mu_{yy}^\lambda q_\lambda (J_y G_y + G_y J_y + G_y^2) + \mu_{xz}^3 J_x J_z q_3 \right] \in A_1.$$

(4.12.)

Проводя необходимые математические операции, получим следующий результат для второй части:

$$\mu_{xx}^1 = 4\sqrt{2} \frac{(B_x^e)^{3/2}}{\omega_1^{1/2}} \cos\gamma,$$

(4.13)

$$\mu_{xx}^2 = 4\sqrt{2} \frac{(B_x^e)^{3/2}}{\omega_2^{1/2}} \sin\gamma,$$

(4.14)

$$\mu_{yy}^1 = 4\sqrt{2} \frac{(B_y^e)^2}{\omega_1^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{\cos\gamma}{(B_x^e)^{\frac{1}{2}}} + \frac{\sin\gamma}{(B_z^e)^{\frac{1}{2}}} \right),$$

(4.15)

$$\mu_{yy}^2 = 4\sqrt{2} \frac{(B_y^e)^2}{\omega_2^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{\sin\gamma}{(B_x^e)^{\frac{1}{2}}} - \frac{\cos\gamma}{(B_z^e)^{\frac{1}{2}}} \right), \quad (4.16)$$

$$\mu_{zz}^1 = 4\sqrt{2} \frac{(B_z^e)^{3/2}}{\omega_1^{1/2}} \sin\gamma, \quad (4.17)$$

$$\mu_{zz}^2 = -4\sqrt{2} \frac{(B_z^e)^{\frac{3}{2}}}{\omega_2^{\frac{1}{2}}} \cos\gamma, \quad (4.18)$$

$$\mu_{xz}^3 = -4\sqrt{2} \frac{(B_z^e)^{\frac{1}{2}} (B_x^e)^{\frac{1}{2}} (B_y^e)^{\frac{1}{2}}}{\omega_3^{\frac{1}{2}}}, \quad (4.19)$$

$$3. \sum_{\alpha\beta\lambda\mu} \mu^{\lambda\mu}_{\alpha\beta} \mathbf{q}_\lambda \mathbf{q}_\mu (\mathbf{J}_\alpha - \mathbf{G}_\alpha)(\mathbf{J}_\beta - \mathbf{G}_\beta). \quad (4.20)$$

Здесь вращательный параметр $\mu^{\lambda}_{\alpha\beta}$ определяется по формуле (4.21)

$$\sum_{\alpha\beta\lambda\mu} \mu^{\lambda\mu}_{\alpha\beta} = \frac{3}{2} \sum_{\lambda\mu} \left(\frac{B_\alpha^e B_\beta^e B_\gamma^e}{\omega_{\lambda}^{\frac{1}{2}} \omega_{\mu}^{\frac{1}{2}}} \right) \left(\frac{8\pi^2 c}{h} \right) a^{\alpha\gamma}_{\lambda} a_{\mu}^{\gamma\beta} \quad (4.21)$$

В итоге получим:

$$\mu_{xx}^{11} = 6 \frac{(B_x^e)^2}{\omega_1} \cos^2\gamma, \quad (4.22)$$

$$\mu_{xx}^{12} = 6 \frac{(B_x^e)^2}{\omega_1^{\frac{1}{2}} \omega_2^{\frac{1}{2}}} \cos\gamma \sin\gamma,$$

(4.23)

$$\mu_{xx}^{22} = 6 \frac{(B_x^e)^3}{\omega_2} \sin^2 \gamma,$$

(4.24)

$$\mu_{yy}^{11} = 6 \frac{(B_y^e)^2}{\omega_1} \left(\frac{\cos \gamma}{(B_x^e)^{\frac{1}{2}}} + \frac{\sin \gamma}{(B_z^e)^{\frac{1}{2}}} \right)^2,$$

(4.25)

$$\mu_{yy}^{12} = 6 \frac{(B_y^e)^3}{\omega_1^{\frac{1}{2}} \omega_2^{\frac{1}{2}}} \left(\frac{\cos^2 \gamma}{(B_x^e B_z^e)^{\frac{1}{2}}} - \frac{\cos \gamma \sin \gamma}{(B_x^e)} + \frac{\cos \gamma \sin \gamma}{(B_z^e)} - \frac{\sin^2 \gamma}{(B_x^e B_z^e)^{\frac{1}{2}}} \right),$$

(4.26)

$$\mu_{yy}^{22} = 6 \frac{(B_y^e)^3}{\omega_2} \left(-\frac{\sin \gamma}{(B_x^e)^{\frac{1}{2}}} + \frac{\cos \gamma}{(B_z^e)^{\frac{1}{2}}} \right)^2,$$

(4.27)

$$\mu_{zz}^{11} = 6 \frac{(B_z^e)^2}{\omega_1} \sin^2 \gamma,$$

(4.28)

$$\mu_{zz}^{12} = -6 \frac{(B_z^e)^2}{\omega_1^{\frac{1}{2}} \omega_2^{\frac{1}{2}}} \cos \gamma \sin \gamma,$$

(4.29)

$$\mu_{zz}^{22} = 6 \frac{(B_z^e)^3}{\omega_2} \cos^2 \gamma,$$

(4.30)

$$\mu_{xz}^{33} = 6 \frac{B_x^e B_y^e}{\omega_3}.$$

(4.31)

В результате нашего анализа были получены формулы, однако вывод этих формул оказался чрезвычайно сложен, поэтому был написан компьютерный код в пакете MAPLE. В приложении В приведен полный код написанной программы.

В качестве проверки полученных выражений, были рассчитаны коэффициенты μ_x^1 , μ_x^4 и μ_x^5 для молекулы $^{32}\text{SO}_2$ полосы ν_2 . На основании чего проведен сравнительный анализ с работой [23]. Как видно, из таблицы 4.3. разница между расчетными значениями и значениями из работы [23] не

отличаются более чем на 3%, что, безусловно, говорит о корректности полученных выражений.

Таблица 4.3. - Сравнение рассчитанных и экспериментально полученных значений коэффициентов μ_x^1 , μ_x^4 и μ_x^5 молекулы $^{32}\text{SO}_2$ полосы ν_2

| Оператор | Коэффициенты | |
|---------------------|------------------------|------------------------|
| | Работа [23] | Настоящая работа |
| K_{zx} | -0.13573 | -0.1343 |
| $\{iK_{zy}, J_z\}$ | 0.585×10^{-3} | 0.595×10^{-3} |
| $\{iK_{zz}, iJ_y\}$ | 0.533×10^{-4} | 0.55×10^{-4} |

Глава 5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

5.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности

проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

5.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Полученные результаты создаю основу для более детального понимания процессов происходящих в молекулах XU_2 - типа и могут быть использованы в качестве теоретической основы для новых исследований молекул такого класса.

Данная научно-исследовательская работа выполнялась в помещении кафедры общая физика третьего корпуса Томского Политехнического университета в кабинете 126.

5.1.2 Анализ конкурентных технических решений

Целесообразно проводить данный анализ с помощью оценочной карты, пример которой приведен в табл. 1. Для этого необходимо отобрать не менее трех-четырёх конкурентных товаров и разработок.

K_1 – результат расчёта руководителя Уленеков в 1985 году

K_2 – результат расчёта Floud в 1975 году

Таблица 5.1 - Оценочная карта для сравнения конкурентных технических

| Критерии оценки | Вес критерия | Баллы | Конкурентоспособность |
|------------------------|---------------------|--------------|------------------------------|
| | | | |

| | | Б _ф | Б _{к1} | Б _{к2} | К _ф | К _{к1} | К _{к2} |
|---|------|----------------|-----------------|-----------------|----------------|-----------------|-----------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
| Технические критерии оценки ресурсоэффективности | | | | | | | |
| Повышение производительности труда пользователя | 0.05 | 4 | 3 | 3 | 0.20 | 0.15 | 0.15 |
| Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей) | 0.05 | 4 | 4 | 4 | 0.20 | 0.20 | 0.20 |
| Надежность | 0.05 | 5 | 3 | 3 | 0.25 | 0.15 | 0.15 |
| Безопасность | 0.15 | 5 | 4 | 4 | 0.75 | 0.60 | 0.60 |
| Простота эксплуатации | 0.05 | 4 | 4 | 4 | 0.20 | 0.20 | 0.25 |
| Уровень шума | 0.15 | 5 | 3 | 4 | 0.75 | 0.45 | 0.60 |
| Возможность подключения в сеть ЭВМ | 0.20 | 5 | 2 | 3 | 1.00 | 0.40 | 0.60 |
| Экономические критерии оценки эффективности | | | | | | | |
| 1. Конкурентоспособность продукта | 0.05 | 4 | 5 | 4 | 0.20 | 0.25 | 0.20 |
| 2. Уровень проникновения на рынок | 0.05 | 3 | 4 | 4 | 1.00 | 0.20 | 0.20 |
| 3. Предполагаемый срок эксплуатации | 0.05 | 4 | 4 | 4 | 0.20 | 0.20 | 0.20 |
| 4. Послепродажное обслуживание | 0.05 | 5 | 3 | 4 | 0.25 | 0.15 | 0.20 |

| | | | | | | | |
|--------------------------------------|------|----|----|----|------|------|------|
| 5. Срок выхода на рынок | 0.05 | 4 | 5 | 3 | 0.20 | 0.25 | 0.15 |
| 6. Финансирование научной разработки | 0.05 | 5 | 5 | 5 | 0.25 | 0.25 | 0.25 |
| Итого | 1 | 57 | 49 | 47 | 4.60 | 3.45 | 3.75 |

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \times B_i \quad (5.1.1)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента; B_i – вес показателя (в долях единицы); B_i – балл i -го показателя.

5.1.3 Технология QuaD

Технология QuaD (QUALITY ADVISOR) - это гибкий инструмент измерения характеристик, характеризующих качество нового развития и его перспективы на рынке и позволяющие принять решение возможности инвестирования в исследования проект.

Для упрощения процедуры проведения QuaD рекомендуется оценку проводить в табличной форме (табл. 4.2)

Таблица 4.2 - Оценочная карта для сравнения конкурентных технических решений

| Критерии оценки | Вес критерия | Баллы | Максимальный балл | Относительное значение (3/4) | Средневзвешенное значение (3x2) |
|--|--------------|-------|-------------------|------------------------------|---------------------------------|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| Показатели оценки качества разработки | | | | | |

| | | | | | |
|--|----------|--------------|------------|--------------|--------------|
| Энергоэффективность | 0.05 | 80 | 100 | 0.80 | 4 |
| Время производства | 0.05 | 92 | 100 | 0.92 | 4.6 |
| Надежность | 0.05 | 87 | 100 | 0.87 | 4.35 |
| Безопасность | 0.15 | 88 | 100 | 0.88 | 13.2 |
| Простота эксплуатации | 0.05 | 95 | 100 | 0.95 | 4.75 |
| Уровень шума | 0.15 | 90 | 100 | 0.90 | 13.5 |
| Ремонтопригодность | 0.20 | 100 | 100 | 1 | 5 |
| Показатели оценки коммерческого потенциала разработки | | | | | |
| Конкурентоспособность продукта | 0.05 | 80 | 100 | 0.80 | 4 |
| Уровень проникновения на рынок | 0.05 | 70 | 100 | 0.70 | 3.5 |
| Унифицированность | 0.05 | 77 | 100 | 0.77 | 3.85 |
| Послепродажное обслуживание | 0.05 | 93 | 100 | 0.93 | 4.65 |
| Срок выхода на рынок | 0.05 | 86 | 100 | 0.86 | 4.35 |
| Финансирование научной разработки | 0.05 | 96 | 100 | 0.96 | 4.85 |
| Перспективность рынка | 0.05 | 98 | 100 | 0.98 | 4.95 |
| Итого | 1 | 94.77 | 100 | 0.947 | 79.55 |

Оценка качества и перспективности по технологии QuaD определяется по формуле:

$$\Pi_{cp} = \sum B_i B_i \quad (5.1.2)$$

где $\Pi_{\text{ср}}$ – средневзвешенное значение показателя качества и перспективности научной разработки;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – средневзвешенное значение i -го показателя.

Исходя из результатов оценки качества и перспектив, делается вывод об объеме инвестиций в текущее развитие и направлении его дальнейшего совершенствования.

Технология может использоваться при проведении различных маркетинговых исследований, что значительно снижает их трудоемкость и повышает точность и надежность результатов.

5.1.4 SWOT-анализ

SWOT - Сильные стороны (strong points), Слабые стороны (weak points), Возможности (opportunities) и Угрозы (threats) - представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта. SWOT-анализ применяют для исследования внешней и внутренней среды проекта.

Использование интерактивной матрицы (см. 4.3) помогает разобраться с несколькими комбинациями по областям. SWOT.

Таблица 5.3 - Матрица SWOT

| | | |
|--|---|--|
| | <p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта: С1. Заявленная экономичность энергоэффективность технологии. С2. Экологичность технологии. С3. Более низкая стоимость производства по сравнению с другими технологиями. С4. Наличие бюджетного финансирования. С5. Квалифицированный персонал.</p> | <p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта: Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки Сл2. Отсутствие у потенциальных потребителей квалифицированных кадров по работе с научной разработкой Сл3. Отсутствие инжиниринговой компании, способной построить производство под ключ Сл4.</p> |
|--|---|--|

| | | |
|---|---|---|
| | | Отсутствие необходимого оборудования для проведения испытания опытного образца Сл5. Большой срок поставок материалов и комплектующий, используемые при проведении научного исследования |
| Возможности: В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ В2. Появление дополнительного спроса на новый продукт В4. Снижение таможенных пошлин на сырье и материалы, используемые при научных исследованиях | По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности» можно сделать вывод о том, что нужно расширить лабораторию и попытаться улучшить программного обеспечения, чтобы увеличить программного обеспечения. | По результатам анализ интерактивной матрицы проекта полей стороны и <Слабые возможности> можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования, чтобы уменьшить трудоёмкость работы. |
| Угрозы: У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства | По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и угрозы» можно сделать вывод о том | По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы» можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования. При необходимости можно стремиться к сотрудничеству с другими научными центрами. |

Таблица 5.4 - Интерактивная матрица проекта.

| Сильные стороны проекта | | | | | | |
|-------------------------|----|----|----|----|----|----|
| Возможности проекта | | C1 | C2 | C3 | C4 | C5 |
| | B1 | + | + | - | 0 | + |
| | B2 | - | + | + | - | 0 |
| | B3 | - | + | + | - | 0 |
| | B4 | + | - | 0 | + | 0 |

5.2 Планирование научно-исследовательской работы

5.2.1 Планирование этапов работ

Для определения общего содержания работ, уточнения целей и разработки последовательных действий необходимо составить календарный график выполнения НИОКР.

Таблица 5.5 - Перечень этапов, работ и распределение исполнителей.

| Основные этапы | № раб | Содержание работ | Должность исполнителя |
|----------------|-------|--|-----------------------|
| Разработка | 1 | Составление и утверждение технического | Руководитель |

| | | | |
|--|----|---|------------------------|
| технического задания | | задания | |
| Выбор направления исследований | 2 | Подбор и изучение материалов по теме | бакалавр |
| | 3 | Проведение патентных исследований | бакалавр |
| | 4 | Выбор направления исследований | Руководитель, бакалавр |
| | 5 | Календарное планирование работ по теме | Руководитель, бакалавр |
| Теоретические и экспериментальные исследования | 6 | Выбор методики для исследований | Руководитель, бакалавр |
| | 7 | Ознакомление с методикой исследованием и программным обеспечением | Руководитель, бакалавр |
| | 8 | Проведения расчета на ПЭВМ | бакалавр |
| Обобщение и оценка результатов | 9 | Проверка полученных результатов | бакалавр |
| | 10 | Оформление заключение | бакалавр |
| Оформление отчета по НИР (комплекта документации по ОКР) | 11 | Составление пояснительной записки | бакалавр |
| | 12 | Оформление дипломной работы и подготовка к защите | бакалавр |

5.2.2 Определение трудоемкости выполнения НИОКР

Затраты на оплату труда в большинстве случаев составляют основную часть расходов на развитие, поэтому важным моментом является определение трудоемкости каждого из участников научных исследований.

Кропотливость проведения научных исследований оценивается экспертно в человеко-днях и носит вероятностный характер, поскольку зависит от многих факторов, которые трудно принять во внимание. Для определения

Ожидаемое (среднее) значение трудозатрат определяется следующей формулой:

$$t_{\text{ож}i} = \frac{3 \cdot t_{\text{min}i} + 2 \cdot t_{\text{max}i}}{5} \quad (5.2.1)$$

где $t_{\text{ож}i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы чел.-дн.;

$t_{\text{min}i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (оптимистическая оценка: в предположении наиболее благоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.;

$t_{\text{max}i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы (пессимистическая оценка: в предположении наиболее неблагоприятного стечения обстоятельств), чел.-дн.

Исходя из ожидаемой трудоемкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями.

$$T_{pi} = \frac{t_{\text{ож}i}}{Ч_i} \quad (5.2.2)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дн.;

$t_{\text{ож}i}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.

$Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

5.2.3 Техническая готовность темы

Определение технической готовности темы позволяет дипломнику точно знать, на каком уровне выполнения находится определенный этап или работа.

Для начала следует определить удельное значение каждой работы в общей продолжительности работ:

$$Y_i = \frac{T_{pi}}{T_p} \times 100\% \quad (5.2.3)$$

где Y_i – удельное значение каждой работы в %;

T_{pi} – продолжительность одной работы, раб.дн.;

T_p – суммарная продолжительность темы, раб.дн.

Тогда техническую готовность темы Γ_i , можно рассчитать по формуле:

$$\Gamma_i = \frac{\sum_{i=1} T_{pi}}{T_p} \times 100\% \quad (5.2.4)$$

где $\sum T_{pi}$ – нарастающая продолжительность на момент выполнения i -той работы.

5.2.4 Построение графика работ

При поступлении в аспирантуру студенты обычно становятся участниками относительно небольших научных тем. Поэтому наиболее удобным и очевидным является построение ленточного графика для проведения научной работы в виде диаграммы Ганта.

Для удобства заговора продолжительность каждого этапа работы с рабочего дня должна быть переведена в календарные дни.

Для этого используйте следующую формулу:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k \quad (5.2.5)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях;

T_{pi} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях;

$k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k = \frac{T_{\text{кг}}}{T_{\text{кг}} - T_{\text{вд}} - T_{\text{пд}}} \quad (5.2.6)$$

где $T_{\text{кг}}$ – количество календарных дней в году;

$T_{\text{пд}}$ – количество праздничных дней в году;

$T_{\text{вд}}$ – количество выходных дней в году.

В 2017 году 365 календарных дней, из них 52 выходных для и 14 праздничных дней. Тогда коэффициент календарности равен:

$$k = \frac{T_{\text{кг}}}{T_{\text{кг}} - T_{\text{вд}} - T_{\text{пд}}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22$$

Таблица 5.6 - Временные показатели проведения научного исследования.

| Название работы | Трудоёмкость работ | | | | | | Исполнит е ли | Длительн о сть работ в рабочих днях | Длительност ь работ в календарных днях | | | |
|---|--------------------|----|-----------|----|------------|------|------------------|---|---|-----|---|----|
| | t_{min} | | t_{max} | | $t_{ожсi}$ | | | | | | | |
| | Р | Б | Р | Б | Р | Б | | | | Р | Б | Р |
| Составление и утверждение технического задания | 4 | - | 8 | - | 5.6 | - | + | - | 2.8 | - | 4 | - |
| Подбор и изучение материалов по теме | - | 2 | - | 5 | - | 3.3 | - | + | - | 1.6 | - | 2 |
| Проведение патентных исследований | - | 12 | - | 20 | - | 15.2 | - | + | - | 7.6 | - | 10 |
| Выбор направления исследований | 2 | 2 | 4 | 4 | 3 | 3 | + | + | 1.7 | 1.7 | 2 | 2 |

| | | | | | | | | | | | | |
|---|---|----|---|----|---|------|---|---|---|-----|---|----|
| Календарное планирование работ по теме | 4 | 4 | 4 | 3 | 3 | 3 | + | + | 2 | 2 | 3 | 3 |
| Выбор методики для исследований | 3 | 3 | 5 | 5 | 8 | 8 | + | + | 4 | 4 | 5 | 5 |
| Ознакомление с методикой исследованием и программным обеспечением | 3 | 3 | 2 | 2 | 5 | 5 | + | + | 3 | 3 | 4 | 4 |
| Проведения расчета на ПЭВМ | - | 10 | - | 15 | - | 12.5 | - | + | - | 7.5 | - | 10 |
| Проверка полученных результатов | - | 5 | - | 15 | - | 13 | - | + | - | 5 | - | 7 |
| Оформление заключение | - | 2 | - | 3 | - | 2.5 | - | + | - | 2 | - | 3 |
| Составление пояснительной записки | - | 3 | - | 3 | - | 2.5 | - | + | - | 2 | - | 3 |
| Оформление дипломной работы и подготовка к защите | - | 10 | - | 15 | - | 12.5 | - | + | - | 10 | - | 12 |

На основе таблицы. 5.6 составлен график календаря. График построен на максимальную продолжительность работы в рамках научно-исследовательский проект на основе вкладок. 5.9, с разбивкой по месяцам и десятилетиям (10 дней) на период периода сертификации. В то же время

работа над диаграммой должна быть выделена с различным оттенком, в зависимости от исполнителей, ответственных за ту или иную работу.

Таблица 5.7- Календарный план-график проведения НИОКР по теме.

| No раб от | Вид работ | Исполните ли | T _{ki} | Продолжительность выполнения работ | | | | | | | | | | | | | |
|-----------------|--|-------------------------------|-----------------|------------------------------------|---|------|---|---|--------|---|---|-----|---|---|------|---|--|
| | | | | февр | | март | | | апрель | | | май | | | июнь | | |
| | | | | 1 | 2 | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | |
| 1 | Составление и утвержден ие техническо го задания | Руководите ль | 4 | | | | | | | | | | | | | | |
| 2 | Подбор и изучение материалов по теме | бакалавр | 2 | | | | | | | | | | | | | | |
| 3 | Проведени е патентных исследован ий | бакалавр | 10 | | | | | | | | | | | | | | |
| 4 | Выбор направлени я исследован ий | Руководите ль, бакалавр | 2 | | | | | | | | | | | | | | |
| 5 | Календарн ое планирован ие работ по | Руководите ль, бакалавр | 3 | | | | | | | | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|----|--|------------------------|----|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|
| | теме | | | | | | | | | | | | | | | | |
| 6 | Выбор методики для исследований | Руководитель, бакалавр | 5 | | | | | | | | | | | | | | |
| 7 | Ознакомление с методикой исследований и программным обеспечением | Руководитель, бакалавр | 4 | | | | | | | | | | | | | | |
| 8 | Проведение расчетов на ПЭВМ | бакалавр | 10 | | | | | | | | | | | | | | |
| 9 | Проверка полученных результатов | бакалавр | 7 | | | | | | | | | | | | | | |
| 10 | Оформление заключения | бакалавр | 3 | | | | | | | | | | | | | | |
| 11 | Составление пояснительной записки | бакалавр | 3 | | | | | | | | | | | | | | |
| 12 | Оформление дипломной работы и подготовка | бакалавр | 12 | | | | | | | | | | | | | | |

| | | | | | | | | | | | | | | | | | |
|--|----------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|
| | к защите | | | | | | | | | | | | | | | | |
|--|----------|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|--|



бакалавр



руководитель, бакалавр

5.3 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

5.3.1 Расчет материальных затрат НТИ

В материальных затратах, помимо вышесказанного, включают дополнительные расходы на канцелярские принадлежности, диски, картриджи и т. Д. Однако их учет сохраняется в этой статье только в том случае, если они не включены в научную организацию в затраты на использование оборудования или накладных расходов ,

Расчет материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$Z_M = (1 + k_T) \cdot \sum_{i=1}^m C_i \cdot N_{расх i} \quad (4.3.1)$$

где m – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования;

$N_{расх i}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, м² и т.д.);

C_i – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./м² и т.д.);

k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

В данном научно-техническом исследовании нет материальных затрат, так как мы делаем теоретический анализ.

5.3.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ

В этой статье все затраты, связанные с приобретением специальное оборудование для работы по конкретному предмет. Стоимость специального

оборудования определяется в соответствии с действующими принципами, в зависимости от контрактной цены. Расчет затрат по этой статье приведен в таблице. 4,10.

Все расчеты для приобретения специального оборудования и оборудования в организации, но используемые для каждого исполнения конкретной темы, приведены в таблице. 5,10.

Таблица 5.8 - Расчет бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ.

| No | Наименование оборудования | Кол-во единиц оборудования | Цена единицы оборудования, тыс. руб. | Общая стоимость оборудования, тыс. руб. |
|--------|---------------------------|----------------------------|--------------------------------------|---|
| 1 | Персональный компьютер | 1 | 40 | 40 |
| Итого: | | | | 40 |

5.3.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Эта статья включает в себя основную заработную плату научных и инженерных работников, работников типовых мастерских и пилотных проектов, непосредственно участвующих в работе над этой темой.

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением НТИ, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп} \quad (5.3.2)$$

где $Z_{осн}$ – основная заработная плата; $Z_{доп}$ – дополнительная заработная плата (12-20 % от $Z_{осн}$).

Основная заработная плата ($Z_{\text{осн}}$) руководителя от **предприятия** рассчитывается по следующей формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_p \quad (5.3.3)$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата одного работника;

T_p – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;

$Z_{\text{дн}}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}} \quad (5.3.4)$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника, руб.;

M – количество месяцев работы без отпуска в течение года: при отпуске в 24 раб. дня $M = 11,2$ месяца, 5-дневная неделя; при отпуске в 48 раб. дней $M = 10,4$ месяца, 6-дневная неделя;

$F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Таблица 5.9 - Баланс рабочего времени.

| Показатели рабочего времени | Руководитель | Бакалавр |
|-----------------------------|--------------|----------|
| Календарное число дней | 365 | 365 |
| Количество нерабочих дней | | |
| 1. - выходные дни | 52 | 105 |
| 2. - праздничные дни | 14 | 14 |
| Потери рабочего времени | | |

| | | |
|--|-----|-----|
| - отпуск | 48 | 22 |
| - невыходы по болезни | 0 | 0 |
| Действительный годовой фонд рабочего времени | 251 | 222 |

Месячный должностной оклад работника:

$$З_{\text{м}} = З_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}} \quad (5.3.5)$$

где $З_{\text{тс}}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.;

$k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от $З_{\text{тс}}$);

$k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5;

$k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3.

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 5.10.

| Исполнители | Разряд | $k_{\text{д}}$ | $k_{\text{р}}$ | $З_{\text{м}}$, руб | $З_{\text{дн}}$, руб. | $T_{\text{р}}$ | $З_{\text{осн}}$ |
|--------------|---------|----------------|----------------|-------------------------|---------------------------|----------------|------------------|
| Руководитель | 22647.7 | 0.35 | 1.3 | 48650 | 2012 | 18 | 36211 |
| Бакалавр | 14874 | 0.35 | 1.3 | 25522.6 | 945,4 | 59 | 55754 |

5.3.4 Отчисления в внебюджетные фонды

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам

государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$З_{внеб} = k_{внеб} \cdot (З_{дон} + З_{дон}) \quad (5.3.6)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.).

Отчисления во внебюджетные фонды рекомендуется представлять в табличной форме.

Таблица - 5.11 Отчисления во внебюджетные фонды.

| Исполнитель | Основная заработная плата, руб. |
|--|---------------------------------|
| Руководитель проекта | 46216 |
| Студент-дипломник | 55754 |
| Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды | 0.271 |
| Итого | 24922.1 |

5.3.5 Накладные расходы

Время использования оборудования: $59 \cdot 12 \text{ час} = 708 \text{ час}$ (бакалавр).
 $18 \cdot 12 \text{ час} = 216 \text{ час}$ (руководитель). Мощность компьютера 400Вт.

Поэтому

$$W = P \cdot t = 708 \cdot 400 = 283200 \text{ Вт/час} = 283,2 \text{ кВт/час}$$

$$W = P \cdot t = 216 \cdot 400 = 86400 \text{ Вт/час} = 86,4 \text{ кВт/час}$$

$$283,2 \cdot 1,58 = 447,5 \text{ руб.} \quad 86,4 \cdot 1,58 = 136,5 \text{ руб.}$$

5.3.6 Формирование бюджет затрат НТИ

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в табл. 5.14.

| Наименование статьи | Сумма, руб. | | Примечание |
|--|--------------|----------|----------------|
| | руководитель | бакалавр | |
| 1. Материальные затраты НТИ | 0 | 0 | |
| 2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ | 40000 | 40000 | Таблица 4.10 |
| 3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы | 36216 | 55754 | Таблица 4.12 |
| 4. Отчисления во внебюджетные фонды | 9790 | 15110 | Таблица 4.13 |
| 5. Накладные расходы | 136,5 | 15110 | |
| 6. Бюджет затрат НТИ | 86052,5 | 111312,5 | Сумма ст. 1- 5 |

Глава 6. Социальная ответственность

6.1 Производная безопасность в компьютерном помещении среды

Социальная ответственность или корпоративная социальная ответственность это ответственность перед людьми и данными им обещаниями, когда организация учитывает интересы коллектива и общества, возлагая на себя ответственность за влияние их деятельности на заказчиков, поставщиков, работников, акционеров (IC CSR 26000:2011).

Данная научно-исследовательская работа выполнялась в помещении кафедры общая физика третьего корпуса Томского Политехнического университета в кабинете 126. Помещение оснащено видео-дисплейными терминалами(ВДТ), персональными электронно-вычислительными машинами(ПЭВМ), компьютерными столами, стульями, кофе машиной и противопожарной сигнализацией.

Помещение относится к классу помещений без повышенной опасности, так как отсутствуют условия, создающие повышенную или особо повышенную опасность.

Для того, чтобы обеспечивать производственную безопасность необходимо проанализировать воздействия на человека вредных и опасных производственных факторов, которые возможно возникают при разработке или эксплуатации проекта.

Все производственные факторы классифицируются по группам элементов: физические, химические, биологические и психофизические. Для данной работы целесообразно рассмотреть физические и психофизические вредные и опасные факторы производства, характерные как для рабочей зоны программиста, как разработчика рассматриваемой в данной работе системы, так и для рабочей зоны пользователя готового продукта – врача-оператора ПЭВМ.

Выявление факторы представлены в таблице 6.1.

Таблица 6.1 - Вредные и опасные производственные факторы при выполнении работ за ПЭВМ .

| Источник фактора, наименование видов работ | Факторы (по ГОСТ 12.0.003-74) | | Нормативные документы |
|--|---|---|---|
| | Вредные | Опасные | |
| 1) Работа за ПЭВМ | 1) Повышенная или пониженная температура воздуха рабочей зоны; 2) Повышенный уровень электромагнитных излучений 3) Недостаточная освещенность рабочей зоны. 4) Монотонный режим работы | 1) Опасность поражения электрическим током; 2) Опасность возникновения пожара. | 1) СанПиН 2.2.4.548-96; 2) СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03; 3) СП 52.13330.2011[3]; 4) ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ; 5) СНиП 21-01-97. |

6.2 Анализ вредных производных факторов окружающей работающей среды

6.2.1 Микроклимат

Микроклиматические параметры - это сочетание температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха. Эти параметры

зависят от функциональной активности человека, его здоровья, а также от надежности работы компьютерных технологий.

Оптимальные и допустимые значения параметров микроклимата приведены в таблице 6.2.

Таблица 6.2 - Оптимальные и допустимые нормы микроклимата.

| Период года | Температура | | | | | Относительная влажность | | Скорость движения воздуха | |
|----------------|-----------------|---------------------------------|-------------|--------|-------------|----------------------------|--------------------|----------------------------------|--------------------------------|
| | Оптим альная | Допустимая на рабочих местах | | | | Оптим альна | Допу стима я | Опти мальн ая, не более | Допус тимая, не более |
| | | Верхняя | | Нижняя | | | | | |
| | | Пост | Не пост. | Пост | Не пост. | | | | |
| Холодный | 22-24 | 25 | 26 | 21 | 18 | 40-60 | 75 | 0.1 | 0.1 |
| Теплый | 23-25 | 28 | 30 | 22 | 20 | 40-60 | 70 | 0.1 | 0.1 |

Повышенная влажность воздуха ($\phi > 85\%$) затрудняет терморегуляцию организма, т.к. происходит снижения испарения пота, а пониженная влажность ($\phi < 20\%$) вызывает пересыхание слизистых оболочек дыхательных путей.

6.2.2 Уровень электромагнитного излучения

Уровень электромагнитных излучений на рабочем месте оператора ПЭВМ является вредным фактором производственной среды, величины параметров которого определяются СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03.

Нарушения в организме человека под воздействием электромагнитных полей малых напряжений обратимы. Наркомания, выход напряжения выше максимально допустимого уровень, развитие нарушения нервной, сердечно-сосудистой системы.

Согласно СанПиН 2.4.1340-03 напряженность электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг ВДТ по электрической составляющей должна быть не более:

в диапазоне частот 5 Гц – 2 кГц – 25 в/м; в диапазоне частот 2 – 400 кГц – 2.5 в/м.

6.2.3 Недостаточная освещённость

Недостаточная освещенность рабочей зоны является вредным производственным фактором, возникающим при работе с ПЭВМ, уровни которого регламентируются СП 52.13330.2011.

Когда есть недостаток освещения, человек испытывает дискомфорт и последствия всего, что может вызвать психическое заболевание, ухудшение зрения, снижение концентрации. В рассматриваемой офисной комнате освещение на поверхности стола в области размещения рабочего документа составляет 300 люкс. Освещение не создает бликов на поверхности экрана. Освещение поверхности экрана составляет около 300 люкс. Яркость общего освещения в диапазоне углов от 50 до 90 градусов с вертикальной в продольной и поперечной плоскостях составляет не более 200 кд / м².

Причиной недостаточной освещенности является отсутствие естественного света, недостаточное искусственное освещение, низкий контраст.

Разряд зрительных работ программиста и оператора ПЭВМ относится к разряду III и под разряд (работы высокой точности). В таблице 5.4 представлены нормативные показатели искусственного освещения при работах заданной точности.

6.3 Анализ опасных производных факторов окружающей работающей среды

Для определения опасных и вредных производственных факторов мы определим работу и операции, связанные с внедрением ВКР . Основная работа была выполнена на рабочем месте с использованием ПК и периферийного оборудования. Работа на ПК относится к категории работ, связанных с опасными и опасными условиями труда. Мы будем изолировать опасные и вредные производственные факторы в соответствии с представленной работой.

Для приведенных работ вредными являются следующие факторы:

- 1.шум на рабочем месте от работы оборудования;
- 2.электромагнитные излучения от мониторов;
- 3.опасность поражения электрическим током.

6.3.1 Электробезопасность

Лаборатория относится к помещению без повышенной опасности поражения электрическим током (в которой отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность).

Помещение без повышенной опасности (сухое, хорошо отапливаемое, помещение с токонепроводящими полами, с температурой 18–20 С°, с влажностью 40–50%. Электробезопасность является опасным фактором и обычно она связана со следующими источниками:

- поражение электрическим током;
- статическое электричество;
- молниезащита. Мероприятия защиты при электробезопасности следующие:
- отключать электрооборудование при его ремонте;

- периодически снимать электростатическое напряжение, касаясь пальцами рук, заземленных поверхностей;
- для безопасности во время гроз необходимо удостовериться о наличие молниеотвода, и того факта, что все розетки в кабинете заземлены.

В отличие от других источников опасности электрический ток нельзя обнаружить без специального оборудования и приборов, поэтому воздействие его на человека чаще всего неожиданно.

Особое внимание необходимо уделять защите от статического электричества. Для его снижения применяют специальное покрытие полов, которое выполнено из линолеума антистатического поливинилхлоридного. К другому методу защиты можно отнести нейтрализацию зарядов ионизированным воздухом.

6.3.2 Опасность возникновения пожара

Возникновение огня является опасным фактором производства, поскольку пожар на заводе причиняет большой материальный ущерб и часто сопровождается травмами и несчастными случаями. И пожары приводят к полной потере информации и большим трудностям в полной восстановлении всей информации.

Регулирование пожаробезопасности производится СНиП 21-01-97.

Возможные виды источников воспламенения:

- Искра при разряде статического электричества;
- Искры от электрооборудования;
- Искры от удара и трения;
- Открытое пламя.

Согласно требованиям, в офисе необходимо вести журнал регистрации противопожарного инструктажа, инструкцию о мерах пожарной безопасности и инструкцию о порядке действий персонала при пожаре. Здание должно соответствовать требованиям пожарной безопасности, а именно, наличие

сотрудников не будет сильно увеличивать влияние факторов, поскольку это происходит один раз.

6.4.3 Рекомендации по минимизации влияния освещения

Для обеспечения требуемого уровня освещенности в помещении используются дневные лампы, равномерно распределенные по всему потолку офиса. Для освещения помещений выбираются наиболее широко используемые лампы типа LB.

6.4.4 Рекомендации по защите от электрического тока

Опасное и вредное воздействие на людей: электрический ток, электрическая дуга и электромагнитные поля проявляются в виде электрических травм и профессиональных заболеваний.

Для защиты от поражения электрическим током все токоведущие части должны быть защищены от случайного контакта с корпусами, корпус устройства должен быть заземлен. Заземление изолированного медного проводника с поперечным сечением 1,5 мм², которое соединено с общей дорожкой заземления с полным поперечным сечением 5,4 мм² при сварке. Общая шина подключена к земле, сопротивление которой не должно превышать 4 Ом. Устройство должно питаться от панели питания через автоматический предохранитель, который срабатывает при коротком замыкании нагрузки.

При эксплуатации ЭВМ запрещается:

- 1.включать ЭВМ при неисправной защите электропитания;
- 2.подключать и отключать разъемы кабелей электропитания и блоков вентиляции при поданном напряжении электросети;
- 3.заменять съемные элементы под напряжением;
- 4.производить пайку аппаратуры, находящейся под напряжением;

- 5.снимать щиты, закрывающие доступ к токоведущим частям;
- 6.пользоваться электроинструментами с напряжением 36В и выше с незаземленными корпусами.

6.4.5 Меры по обеспечению пожарной безопасности

Одним из условий обеспечения пожаробезопасности любого производственного процесса является ликвидация возможных источников воспламенения. Для устранения возможности пожара в помещении должны соблюдаться следующие противопожарные меры:

- 1.ограничение количества горючих веществ;
- 2.устранение возможных источников возгорания (электрических искр, нагрева оболочек оборудования);
- 3.применение средств пожаротушения;
- 4.использование пожарной сигнализации;
- 5.содержание электрооборудования в исправном состоянии, использование плавких предохранителей и автоматических выключателей в аппаратуре, по окончании работ все установки должны обесточиваться;

6.5 Экологическая безопасность

В этом разделе рассматривается влияние на участие в этом исследовании.

Это исследование программного обеспечения и работы для ПЭВМ не является экологически опасным, потому что результат, который выполняется в этой работе, а также объекты, на которых будет осуществляться его использование, ПК принадлежит предприятиям пятого класса.

Люминесцентные лампы, используемые для рабочих мест искусственного освещения, также требуют специального удаления, поскольку они содержат от

10 до 70 мг ртути, что является чрезвычайно опасным химическим веществом и может вызвать отражения живых существ, а также загрязнение атмосферы, гидросферы и литосферы. Срок службы таких ламп составляет около 5 лет, после чего они должны быть переданы для обработки в специальных точках приема. Юридические лица закрывают лампы для обработки и сохраняют паспорт на этот вид отходов.

6.6 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Лаборатория расположена в городе Томск с континентально-циклоническим климатом и природные явления (землетрясения, наводнения, засухи, ураганы и т. д.), в данном городе отсутствуют. Возможными ЧС на объекте в данном случае в городе Томск могут быть сильные морозы и

диверсия. Для Сибири в зимнее время года характерны морозы и метели. В результате порывов ветра могут быть обрывы линий электропитания, из-за чего возможны перебои в электроснабжении; перегрузки, которые могут стать причиной пожара. Для предотвращения подобных ситуаций необходима организация системы аварийного электропитания, по возможности проведение линии электроснабжения под землей. Низкие температуры могут привести к авариям систем теплоснабжения. В случае переморозив труб должны быть предусмотрены запасные обогреватели. Их количества и мощности должно хватать для того, чтобы работа на производстве не прекратилась. В последнее время, в связи с внешней политикой страны, возможны проявления диверсии. Угрозы могут быть как ложным, так и действительными, поэтому необходимы меры предосторожности по этому поводу. В качестве мер безопасности могут быть приняты следующие действия— установка системы видеонаблюдения и круглосуточной охраны, сохранение конфиденциальной информации о охранной системе. Необходимо так же проводить информирование должностных лиц и тренировки по отработке действий на случай экстренной эвакуации.

6.7 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

1. СН 245-71. Санитарные нормы проектирования промышленных предприятий.
2. ГОСТ 12.11.005-88. Общие санитарно-технические требования к воздуху рабочей зоны.
- 3.СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.
- 4.СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278-03.Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещенному освещению жилых и общественных зданий.
- 5.СанПиН 2.2.2.542-96. Гигиенические требования к видеодисплейным терминалам, персональным электронно-вычислительным машинам и организации работ.
- 6.ГОСТ 12.1.009 – 2009. Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Термины и определения
- 7.ГОСТ 12.1.030 – 81. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление.
- 8.ГОСТ 12.1.038-82 (2001). Электробезопасность. Предельно допустимые значения прикосновения и токов.
- 9.НПБ 105-03. Определение категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности.
- 10.СНиП 21-01-97. Пожарная безопасность зданий и сооружений.

Заключение

Знание интенсивностей спектральных линий является важной информацией, которая позволяет решать задачи широкого круга приложений, таких как астрофизика, планетология и атмосферная оптика. На сегодняшний день, существует проблема нахождения интенсивностей отдельных линий даже для трех и более атомных молекул. Разработанный в этой работе подход является одним из решений этой трудновыполнимой задачи. Поэтому проведенный анализ в этой работе является **актуальным и значимым**.

Полученные результаты:

1. Исследованы основные принципы построения эффективного гамильтониана. Определена матрица унитарного преобразования. Получена новая волновая функция эффективного гамильтониана.
2. Построена конечномерная матрица эффективного дипольного момента. Для молекулы SO_2 полосы ν_2 были определены 1, 4 и 5 коэффициенты в разложении оператора эффективного дипольного момента.
3. Проведен количественный анализ полученных выражений (Таблица 4.3).
4. Для численных расчетов был написан код с использованием аналитического языка программирования MAPLE17.

Полученные результаты создаю основу для более детального понимания процессов происходящих в молекулах XY_2 - типа и могут быть использованы в качестве теоретической основы для новых исследований молекул такого класса.

Приложение А

Характеры группы C_{2v}

| C_{2v} | E | C_2 | σ_{xy} | σ_{xz} | Операторы | |
|----------|---|-------|---------------|---------------|-----------|----------|
| A_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | | |
| A_2 | 1 | 1 | -1 | -1 | J_x | k_{zx} |
| B_1 | 1 | -1 | 1 | -1 | J_y | k_{zz} |
| B_2 | 1 | -1 | -1 | 1 | J_z | |

Приложение Б

Симметрия операторов

| q_1 | q_2 | q_3 | p_1 | p_2 | p_3 | J_x | J_y | J_z |
|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|-------|
| A_1 | A_1 | B_1 | A_1 | A_1 | B_1 | B_2 | B_1 | A_1 |

Приложение В

Компьютерный код в пакете MAPLE для расчета вращательных параметров.

```

### Главные моменты инерции
Ie[XYZ[1], XYZ[1], e] := h/(8*B[XYZ[1], e]*Pi^2*c);
Ie[XYZ[2], XYZ[2], e] := h/(8*B[XYZ[2], e]*Pi^2*c);
Ie[XYZ[3], XYZ[3], e] := h/(8*B[XYZ[3], e]*Pi^2*c);
### Расчет коэффициентов Кориолиса

```



```

ksi[1,3] := -(Ie[XYZ[1], XYZ[1], e]/Ie[XYZ[2], XYZ[2],
e])^(1/2)*sin(theta)+(Ie[XYZ[3], XYZ[3], e]/Ie[XYZ[2], XYZ[2],
e])^(1/2)*cos(theta);
ksi[2,3] := (Ie[XYZ[1], XYZ[1], e]/Ie[XYZ[2], XYZ[2],
e])^(1/2)*cos(theta)+(Ie[XYZ[3], XYZ[3], e]/Ie[XYZ[2], XYZ[2],
e])^(1/2)*sin(theta);

```

###Элементы матрицы $a_{\alpha\beta}^{\lambda}$

```

a[1, XYZ[1], XYZ[1]] := 2*Ie[XYZ[1], XYZ[1], e]^(1/2)*cos(theta);
a[2, XYZ[1], XYZ[1]] := 2*Ie[XYZ[1], XYZ[1], e]^(1/2)*sin(theta);
a[1, XYZ[2], XYZ[2]] := 2*Ie[XYZ[2], XYZ[2], e]^(1/2)*T[2];
a[2, XYZ[2], XYZ[2]] := -2*Ie[XYZ[2], XYZ[2], e]^(1/2)*T[1];
a[1, XYZ[3], XYZ[3]] := 2*Ie[XYZ[3], XYZ[3], e]^(1/2)*sin(theta);
a[2, XYZ[3], XYZ[3]] := -2*Ie[XYZ[3], XYZ[3], e]^(1/2)*cos(theta);
a[3, XYZ[1], XYZ[3]] := -2*(Ie[XYZ[3], XYZ[3], e]*Ie[XYZ[1], XYZ[1],
e]/Ie[XYZ[2], XYZ[2], e])^(1/2);

```

Параметр $\mu_{\alpha\beta}^{\lambda}$

```

for i to 3 do for j to 3 do
for lambda to 3 do

```

```

mu[XYZ[i], XYZ[j], lambda] :=
2*sqrt(2)*B[XYZ[i], e]*B[XYZ[j], e]*(8*Pi^2*c/h)^(1/2)*a[lambda, XYZ[i],
XYZ[j]]*q[lambda]/omega[lambda]^(1/2)

```

```

end do end do end do;

```

Параметр $\mu_{\alpha\beta}^{\lambda\mu}$

```

for i to 3 do
for j to 3 do
for k to 3 do
for lambda to 3 do
for h to 3 do

```

```

H[XYZ[i], XYZ[j], XYZ[k], lambda, h] :=
((3/2)*B[XYZ[i], e]*B[XYZ[j],
e]*B[XYZ[k], e]/(omega[lambda]^(1/2)*omega[h]^(1/2)))*(8*Pi^2*c/h))*a[lambda, XYZ[i],
XYZ[k]]*a[h, XYZ[k], XYZ[j]]*q[lambda]*q[h]

```

```

end do end do end do end do end do;

```

Список литературы

1. Любарский Г. Я. Теория групп и ее применение в физике. М.: Физматгиз, 1958. – С. 355.
2. Ландау Л. Д. Теоретическая физика. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1963.-С. 702.
3. Wallace P. J. Volcanic SO₂ emissions and the abundance and distribution of exsolved gas in magma bodies // Journal of Volcanology and Geothermal Research. – 2001. – V. 108. – p. 85–106
4. Self S, Rampino M. R., Barbera J. J. The possible effects of large 19th and 20th century volcanic eruptions on zonal and hemispheric surface temperatures// Journal of Volcanology and Geothermal Research. – 1981. – V. 11. – p. 41–60
5. Lovas F. J. Microwave spectra of molecules of astrophysical interest. XXII. Sulfur dioxide (SO₂) // J. Phys. Chem. Ref. Data. – 1985. – V. 14. – p. 395–488.
6. Давыдов А. С. Квантовая механика. М.: Наука, 1975. – С. 703.
7. Wigner E. P. Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra // Academic press, New York.-1959.- p. 443.
8. Банкер Ф. Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия. М.: Издательство Мир, 1981.-С. 451.
9. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. М.: ИЛ, 1949.- С. 647.
10. Watson J. K. G. Simplification of the molecular vibrational-rotational Hamiltonian// Molecular Physics, – 1968. – V. 15. – p. 479–490.
11. Watson. J. K. G. Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules // J. Chem. Phys. – 1967. –V. 46 – p.1935-1949.
12. Ландау Л. Д. Теоретическая Физика. М.: Издательство «Наука» главная редакция физико-математической литературы, 1974.-С.752.
13. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных

молекул. М.: ИЛ, 1965.-С. 648.

14. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 1. – Томск: Издательство ТГУ, 1990. – С. 224.

15. Макушкин Ю. С., Улеников О. Н., Чеглоков А. Е. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 2. – Томск: Издательство ТГУ, 1990. – С. 248.

16. Chu P. M., Wetzel S. J., Lafferty W. J. and so on. Line Intensities for the $8\mu\text{m}$ Bands of SO_2 // J. of Mol. Spectroscopy, – 1998. – V. 189. – p. 55–63.

17. Koppel D. E. Analysis of macromolecular polydispersity in intensity correlation spectroscopy: the method of cumulants// J. The Journal of Chemical Physics, – 1972. – V. 57(11). – p. 4814-4820

18. Elliott R. J. Intensity of optical absorption by excitons// J. Physical Review, – 1957. – V. 108(6). – p. 1384.

19. Huang X., Schwenke D.W., Lee T. J., Empirical infrared line lists for five SO_2 isotopologues: $^{32}\text{S}/^{33}\text{S}/^{34}\text{S}/^{36}\text{S}$ $^{16}\text{O}_2$ and $^{32}\text{S}^{18}\text{O}_2$ //J. of Molecular Spectroscopy. – 2015. – V. 311. – p. 19-24

20. Strickler S. J., Berg R. A. Relationship between absorption intensity and fluorescence lifetime of molecules//The Journal of Chemical Physics, – 1962. – V. 37(4). – p. 814–822.

21. Dai H., Stafsud O. M. Polarized absorption spectrum and intensity analysis of trivalent neodymium in sodium β "alumina// Journal of Physics and Chemistry of Solids , – 1991. – V. 52(2). – p. 367–379.

22. Flaud J. M., Camy-Peyret C. Vibration-rotation intensities in H_2O -type molecules application to the $2\nu_2$, ν_1 , and ν_3 bands of H_2^{16}O // J. of Molecular Spectroscopy, – 1975. – V. 55(1-3). – p. 278–310.

23. Ulenikov O. N., Bekhtereva E. S., Gromova O. V., et al. Extended analysis of the high resolution FTIR spectrum of $^{32}\text{S}_{16}\text{O}_2$ in the region of the ν_2 band: Line positions, and pressure broadening widths// JQSRT, –2018.–V. 210.–p. 141–155.